



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA ELÉCTRICA - CAMPO CONTROL

**MODELADO, OBSERVACIÓN Y CONTROL
DE REACTORES DE GASIFICACIÓN**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
ULISES BADILLO HERNÁNDEZ

TUTORES PRINCIPALES
DR. LUIS A. ÁLVAREZ-ICAZA LONGORIA
DR. JESUS ÁLVAREZ CALDERÓN
(PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA)

COMITÉ TUTOR:
DR. WILLIAM VICENTE RODRÍGUEZ

MÉXICO, D.F. JUNIO 2014

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Jesus Álvarez Calderón
Secretario: Dr. Jaime Alberto Moreno Pérez
1er. Vocal: Dr. Luis Agustín Álvarez-Icaza Longoria
2do. Vocal: Dr. William Vicente Rodríguez
3er. Vocal: Dr. Martín Salinas Vázquez

La Tesis se realizó en:
Instituto de Ingeniería-UNAM

TUTORES PRINCIPALES:

Dr. Luis A. Álvarez-Icaza Longoria

FIRMA

Dr. Jesus Álvarez Calderón

FIRMA

A mis padres Amira y Antonio y mis abuelos Epifanía y Agripino, por todas sus enseñanzas pero sobre todo por su perseverancia e integridad.

A mi esposa Esmeralda, por el apoyo incondicional y la invaluable confianza que siempre me brindo, a pesar de los sacrificios y dificultades sorteadas a lo largo de esta investigación.

A mi hijo Ezekiel, que con su curiosidad y alegría infinitas me recuerda que siempre hay mucho por aprender.

Agradecimientos

Un reconocimiento especial a mis dos asesores Luis y Jesus que iluminaron el fascinante camino de mi primera incursión en la investigación científica.

Agradezco el apoyo económico brindado por el CONACYT para la realización de los estudios de doctorado.

Índice general

Índice de figuras	VI
Índice de tablas	VIII
1. Introducción	3
1.1. Motivación.	8
1.2. Objetivo general.	10
1.3. Hipótesis.	10
1.4. Contribuciones.	11
1.5. Organización de la tesis.	12
2. Planteamiento del problema de modelado.	14
2.1. Relevancia en la ingeniería de control.	14
2.1.1. Problemas de control y optimización.	16
2.1.2. Problemas de estimación o predicción.	18
2.2. Clase de reactores de gasificación modelados.	18
2.3. Estado del arte de modelado de gasificadores de lecho empacado.	20
2.4. Antecedentes del marco de modelado propuesto.	22
2.5. Modelo general en parámetros distribuidos del reactor.	25
2.6. Problema de modelado.	28
2.7. Caso de estudio.	29
3. Estequiometría de la red de reacción.	34
3.1. Conjunto de reacciones independientes.	35
3.2. Representación reactiva-no reactiva de balances molares por fase.	37
3.3. Estequiometría de la gasificación de biomasa.	39
4. Reducción del modelo distribuido del gasificador de lecho móvil.	43
4.1. Forma estándar de perturbaciones singulares.	44
4.2. Modelo distribuido de orden reducido.	48
4.3. Modelo distribuido de capa límite.	50
4.4. Equilibrio térmico entre fases.	52

5. Representación en dimension finita del reactor de gasificación.	58
5.1. Bases metodológicas.	58
5.2. Modelos de N tanques agitados de sistemas distribuidos.	60
5.2.1. Criterios de selección de N	62
5.2.2. Fundamentos metodológicos del modelo de N tanques.	63
5.3. Métodos numéricos de discretización espacial.	64
5.3.1. Los mecanismos de transporte del modelo discretizado.	68
5.3.2. Sensibilidad, rigidez y su efecto en el modelo discretizado.	69
5.3.3. Fuentes de error del esquema de modelado de orden reducido.	70
5.4. Modelo de tren de N RCTAs con retromezclado de un gasificador.	72
5.4.1. Semidiscretización espacial del gasificador de lecho empacado.	73
5.4.2. Analogía entre un TRCTA y un reactor de gasificación.	78
6. Método de diseño de modelo propuesto.	85
6.1. Modelo distribuido reducido del reactor.	86
6.2. Modelo reducido en parámetros concentrados	90
6.2.1. Modelo de N -RCTAs del gasificador.	92
6.2.2. Interpolación de los perfiles espaciales.	95
6.3. Problema de diseño de modelo.	97
6.4. Simulaciones numéricas.	99
6.4.1. Comportamiento estático.	100
6.4.2. Dinámica local del reactor.	100
7. Estudio del comportamiento no lineal.	106
7.1. Teoría de estabilidad en gasificadores.	107
7.2. Análisis no lineal nominal del reactor de biomasa.	111
7.3. Caracterización del comportamiento no lineal.	119
7.4. Análisis de resultados.	124
8. Conclusiones	126
8.1. Trabajo futuro.	128
A. Métodos de reducción y simplificación de modelo.	131
A.1. Métodos de perturbaciones singulares.	132
A.2. Métodos de reducción de orden de sistemas distribuidos reactivos.	137
A.2.1. Clasificación de los sistemas en parámetros distribuidos reactivos.	137
A.2.2. Métodos de perturbaciones singulares para sistemas hiperbólicos.	139
A.2.3. Métodos de discretización espacial de orden reducido.	141
B. Teoría de perturbaciones.	146
B.1. Perturbaciones singulares.	151

C. Modelo dinámico de un RCTA multicomponente de dos fases.	156
D. Comportamiento no lineal espurio de modelos discretizados.	164
Bibliografía	166

Índice de figuras

1.1. Distribución experimental axial y radial de temperatura en un gasificador de biomasa caracterizada por Wang y Kinoshita (1993).	8
2.1. Gasificador tubular de lecho empacado de flujos descendentes.	19
2.2. Gasificadores tubulares de lecho empacado de flujos en contracorriente (izquierda) y de flujos paralelos (derecha) All-Power-Labs (2012).	20
5.1. Las dos configuraciones utilizadas en los modelos de N tanques: Serie con flujo Q de una vía (arriba) y Cascada con retro-flujo Q_R (abajo).	60
5.2. Reactor tubular discretizado en N volúmenes V_k separados por superficies S_{k-1} y S_k	73
5.3. Malla de discretización espacial del reactor tubular y el tren de N RCTAs con flujos de retro-mezclado.	78
6.1. Tren de N RCTAs con flujos de retro-mezclado.	92
6.2. Perfiles espaciales de las concentraciones del gas, temperatura y densidades de biomasa y carbonizado en estado estacionario obtenidos con modelos de 3-RCTAs de volumen diferente (gráfica punteada) y 12-RCTAs con volumen uniforme (gráfica sólida).	101
6.3. Perfiles espaciales de las velocidades convectivas del sólido y gas, conversión de carbonizado y velocidades de reacción en estado estacionario obtenidos con el modelo de 3-RCTAs de volumen diferente.	101
6.4. Respuestas transitorias de las densidades de biomasa y carbonizado de efluentes (izquierda), así como de la temperatura de salida y máxima (derecha) de los modelos de 3-RCTAs (gráfica punteada) y de 12-RCTAs (gráfica sólida).	102
6.5. Respuestas transitorias de la velocidad de producción y valor calórico alto del gas de síntesis correspondientes a los modelos de 3-RCTAs (gráfica punteada) y de 12-RCTAs (gráfica sólida).	103
6.6. Respuestas transitorias de las fracciones molares de H_2 y CO en el gas de síntesis correspondientes a los modelos de 3-RCTAs (gráfica punteada) y de 12-RCTAs (gráfica sólida).	103

7.1. Diagramas de bifurcación de la temperatura (izquierda) y el valor calórico alto (derecha) del gas de síntesis efluente con respecto al flujo de aire entrante del modelo de 1-RCTA.	112
7.2. Diagramas de bifurcación de la temperatura del gas de síntesis efluente con respecto al flujo de aire entrante de los modelos de 1, 2, 3, 5-RCTAs de diferente volumen.	114
7.3. Diagramas de bifurcación del poder calórico HHV del gas de síntesis con respecto al flujo de aire entrante de los modelos de 1, 2, 3, 5-RCTAs de diferente volumen.	115
7.4. Los 7 perfiles de EE de algunas concentraciones del gas (H_2 y O_2), temperatura y densidad aparente de biomasa para el modelo de 3-RCTAs de diferente volumen con flujo de aire entrante de $13.5kg/hr$	116
7.5. Diagramas de bifurcación de la temperatura del gas de síntesis efluente con respecto al flujo de aire entrante de los modelos de 1, 2, 3, 5-RCTAs de diferente volumen y dispersión de calor de $\mathcal{D}_H = 0.227cm^2/s$ y $Pe_H = 1.72$	121
7.6. Diagramas de bifurcación del poder calórico HHV del gas de síntesis con respecto al flujo de aire entrante de los modelos de 1, 2, 3, 5-RCTAs de diferente volumen y dispersión de calor de $\mathcal{D}_H = 0.227cm^2/s$ y $Pe_H = 1.72$	122
7.7. Los 5 perfiles de EE de algunas concentraciones del gas (H_2 y O_2), temperatura y densidad aparente de biomasa para el modelo de 3-RCTAs de diferente volumen con flujo de aire entrante de $13.5kg/hr$ y dispersión de calor de $\mathcal{D}_H = 0.227cm^2/s$ y $Pe_H = 1.72$	123
7.8. Diagramas de bifurcación magnificados de la temperatura del gas de síntesis efluente en la región de bajo flujo de aire entrante de los modelos de 3, 5-RCTAs de diferente volumen y dispersión de calor de $\mathcal{D}_H = 0.227cm^2/s$ y $Pe_H = 1.72$	124
C.1. RCTA multicomponente de dos fases termodinámicas.	156

Índice de tablas

2.1. Operadores del modelo del reactor de lecho móvil (2.4).	27
2.2. Cinéticas intrínsecas de reacción del caso de estudio.	28
2.3. Funciones de tasas de reacción.	30
2.4. Nomenclatura	33
3.1. Conjunto de reacciones del caso ejemplo de gasificación de biomasa	39
4.1. Operadores del modelo del reactor de lecho móvil (4.16).	55
6.1. Modelos matemáticos para control, diseño de equipo y proceso.	99
6.2. Comparación de resultados entre estudios de modelado y experimentales.	102
7.1. Características de bifurcación de varios modelos de N -RCTAs.	118

Resumen

Los reactores de gasificación constituyen una alternativa atractiva para la generación de energía con una alta eficiencia a partir de una fuente de carbón. Sin embargo, su aplicación en la actualidad está limitada por problemas de estabilidad y optimización en su operación.

Los estudios experimentales y de modelado de gasificadores han examinado su desempeño en estado estacionario y algunos aspectos locales (cerca de un estado estacionario) de su dinámica. Sin embargo, el problema de analizar características claves como la multiplicidad y estabilidad de estados estacionarios de esta clase de reactores sólo ha sido estudiado parcialmente bajo operación en contracorriente para un gasificador de carbón mediante modelos distribuidos simplificados, mientras que no se ha abordado en gasificadores de biomasa y de flujos paralelos, debido a que los sistemas dinámicos subyacentes son de alto orden, poseen rigidez numérica considerable y exhiben una sensibilidad paramétrica alta, dado que el enfoque estándar de modelado en la literatura de gasificadores consiste en la simulación numérica del modelo distribuido utilizando diferencias finitas y elemento finito con mallas espaciales densas (de 100 a 500 nodos)

Se deduce un método de diseño de modelos dinámicos en parámetros concentrados lo más simples posibles, en términos del número de ecuaciones de estado y su acoplamiento, capaces de capturar y explicar aspectos clave del comportamiento no lineal de reactores de gasificación de lecho empacado como la estabilidad y la multiplicidad de estados estacionarios con una precisión prescrita por el objetivo de modelado a la luz de la incertidumbre experimental. Se combinan un conjunto de técnicas de reducción de modelo, conceptos de redes de reacción y métodos de agregación (lumping) para obtener una estructura de modelo simple, de orden reducido, ajustable y con significado físico: un tren de N RCTAs con retro-mezclado de materia y energía. El número de tanques N y sus volúmenes son diseñados para capturar el comportamiento estático y dinámico de las concentraciones y temperatura del reactor con un grado de precisión determinado por el objetivo específico de modelado (diseño de experimentos, equipo, operación, control y estimación).

El método de modelado es aplicado a un caso de estudio representativo: un gasificador de lecho móvil de flujos concurrentes de biomasa, encontrando que mediante un tren de 3 a 5 RCTAs de diferente volumen, modelado con 9 a 15 ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) es posible: (i) reproducir el comportamiento dinámico y estático alrededor de un estado estacionario de interés práctico con precisión similar a la obtenida con modelos estándar de alto orden de la literatura con 1800 a 7000 EDOs, y (ii) explicar y completar la descripción de aspectos esenciales del comportamiento no lineal como la multiplicidad y estabilidad de los estados estacionarios con un nivel de retro-mezclado de calor entre tanques físicamente relevante, en el sentido de que éste debe incorporar los mecanismos de transporte de calor dispersivos observados experimentalmente para reactores de lecho empacado.

Capítulo 1

Introducción

Los gasificadores son reactores tubulares continuos auto-térmicos donde una fuente de carbono en estado sólido ó líquido reacciona con un oxidante gaseoso (O_2 puro o aire) y varios agentes gasificantes en estado gaseoso (CO_2, H_2O, H_2) produciendo un gas de síntesis con un valor calórico utilizable y con una composición química simple (mezcla de los gases CH_4, H_2O, H_2, CO y CO_2 principalmente).

Una diversidad de reactores tubulares de dos fases de lecho empacado, fluidizado y de transporte son utilizados para llevar a cabo el proceso, diferenciados por la hidrodinámica, es decir, la forma en la que entran en contacto las dos fases y sus velocidades relativas de flujo. Una descripción del estado del arte de la amplia variedad de tecnologías de gasificación se proporciona en (Reed y Das, 1988; Basu, 2006; Higman y van der Burgt, 2008).

Esta tesis dedica su estudio a una clase de reactores: gasificadores de lecho empacado móvil. Este tipo de reactor es el más usado para aplicaciones de pequeña escala debido a que posee buen compromiso entre la calidad del producto y la variabilidad en la composición del combustible sólido a la cual puede tener un desempeño aceptable, así como, a su bajo costo y facilidad de construcción. El 75 % de las plantas comerciales de gasificación de biomasa son basadas en el reactor de flujos concurrentes descendente (Knoef, 2000), mientras que el 89 % de la gasificación del carbón en el mundo se lleva a cabo en el reactor de flujos en contracorriente ascendente (Hobbs *et al.*, 1993).

De acuerdo a la distribución espacial de temperaturas dentro del reactor de gasificación es posible identificar 4 zonas posiblemente adyacentes o traslapadas en los que domina la ocurrencia de los siguientes procesos:

1. **Pre calentamiento y Secado.**
2. **Pirólisis ó devolatilización.**
3. **Combustión.**
4. **Reducción o gasificación.**

En general, el desempeño termo-químico de los reactores de gasificación de sólidos están determinados por dos factores principales:

- El flujo de calor liberado dado por la exotermicidad y la velocidad de las reacciones de combustión desarrolladas en una pequeña región del reactor debido a la baja concentración de oxidante dosificado al reactor.
- La transferencia de calor desde la estrecha zona de combustión hacia las zonas vecinas de mayor tamaño para que se llevan a cabo procesos endotérmicos como el precalentamiento, secado, pirólisis y reducción del combustible sólido.

Los primeros estudios extensivos de modelado (Amundson y Arri, 1978), (Caram y Fuentes, 1982) pusieron énfasis en analizar el comportamiento estático y la sensibilidad paramétrica del proceso de gasificación de carbón a contracorriente de un reactor industrial de lecho empacado tipo Lurgi, mediante un modelo distribuido unidimensional de primeros principios. El desempeño en estado estacionario se caracteriza por:

- Sensibilidad paramétrica alta para un conjunto de valores de flujos de entrada.
- Multiplicidad de hasta 4 estados estacionarios cuya estabilidad y características principales son enumeradas a continuación:
 1. Frente de reacción de combustión estabilizado en la cima del reactor. Equilibrio estable de completa conversión de carbón y alta temperatura máxima (hot-spot).
 2. Reacción estabilizada en la zona intermedia o cerca del fondo del reactor. Equilibrio estable con conversión intermedia a baja y menor temperatura máxima.
 3. Frente de reacción estabilizado en zona superior o intermedia del reactor. Equilibrio posiblemente inestable de alta conversión y temperatura.
 4. Estado de apagado o extinción de la reacción. Estado estacionario estable sin conversión de combustible sólido y operación en modo de intercambio de calor si la temperatura de alimentación de la fase gaseosa es mayor a la del carbón entrante.
- Caram y Fuentes (1982) conjeturan la existencia de un quinto estado estacionario inestable entre el estado de extinción y el equilibrio con frente de reacción cerca del fondo del reactor.
- Fenómeno de histéresis para un intervalo pequeño de valores de parámetros de flujo alimentados de sólido y gas.
- Transición repentina entre estados estacionarios para algunos valores de parámetros de entrada.
- Un frente de reacción viajero ascendente y descendente se produce debido a cambios en el flujo entrante de reactantes.

En consecuencia, dichos estudios proveen una visión parcial del comportamiento no lineal del reactor de carbón en contracorriente debido a que no pudieron determinar un diagrama de bifurcación completo con certeza sobre el número y estabilidad de estados estacionarios por la complejidad de los modelos desarrollados.

Por otra parte, en reactores de flujos descendentes concurrentes de biomasa, algunas de las características del comportamiento estático del reactor de carbón fueron validadas en estudios experimentales y de modelado combinados (Reed y Markson, 1985), (Milligan, 1994), (Barrio *et al.*, 2001) y (Shwe, 2004). Se realizaron mediciones de temperatura en un conjunto de ubicaciones discretas a lo largo del reactor (perfiles espaciales axiales de temperatura), flujo entrante de aire, peso del combustible sólido en el lecho y concentraciones en el gas de síntesis efluente. En particular, se caracterizó la influencia del flujo de aire y biomasa alimentados en su operación y desempeño a lazo abierto de acuerdo a las siguientes observaciones:

- El efecto de los flujos alimentados en el comportamiento dinámico del reactor se manifiesta como cambios en el tamaño de las zonas de pirólisis y reducción del reactor (Milligan, 1994) así como en el desplazamiento del punto más caliente del perfil espacial axial de temperatura observado en un reactor transparente Reed y Markson (1985) :
 - Cuando el flujo de aire alimentado es bajo ($q < q_*$) un frente de flama de combustión móvil ascendente se desarrolla en el reactor. Se dice que este modo de operación dinámico es dominado por la pirólisis debido a que la velocidad de producción de carbonizado es mayor a la velocidad de reducción de carbonizado.
 - Si el flujo de aire entrante es alto, la flama de oxidación y por lo tanto el máximo del perfil espacial de temperatura se desplazan hacia el fondo del reactor con una velocidad determinada por la velocidad de flujo entrante y la velocidad de reducción de carbonizado.
- Al menos 4 estados estacionarios cualitativamente diferentes son observados experimentalmente al variar los flujos de alimentación en esta clase de reactores Reed y Markson (1985):
 1. Para flujos entrantes de aire bajos ($q < q_*$) se presenta un estado estacionario estable de alta conversión, baja producción de alquitranes y con frente de reacción (o punto máximo del perfil espacial de temperatura) ubicado cerca de la cima del reactor (Shwe, 2004).
 2. Con flujos de aire intermedios en un intervalo reducido ($q_* < q < q^*$) el reactor puede exhibir un estado estacionario posiblemente inestable de alta conversión y eficiencia, muy baja concentración de alquitranes y con frente de reacción ubicado en la parte media a lo largo del reactor.
 3. Con flujos de aire mayores ($q > q^*$), es posible que el reactor muestre un estado estacionario estable con intermedia a baja conversión, mayor producción de

alquitranes y con frente de reacción estabilizado en una ubicación axial cercana al fondo o rejilla del reactor.

4. Para flujos alimentados de aire muy altos o muy bajos ($q_* \ll q \ll q^*$) la reacción se abate y se presenta el estado estacionario estable trivial de extinción sin conversión.
 - El estado estacionario de flujos intermedios posiblemente inestable es el óptimo termodinámico para gasificación en el sentido de que provee la máxima producción de energía química como gas combustible con menor contenido de alquitranes y mayor eficiencia que el estado estacionario con frente estabilizado cerca de la cima Milligan (1994).
 - El mecanismo de propagación de calor dominante es la radiación entre las partículas de carbón encendidas desde la zona estrecha de combustión del reactor hacia las partículas de las zonas vecinas endotérmicas superiores de evaporación de humedad y pirólisis e inferiores de reducción de carbonizado Milligan (1994).

Sin embargo, y en vista del análisis de Amundson y Arri (1978) y Caram y Fuentes (1982), no es claro si los distintos modos de operación en estado estacionario a lazo abierto son únicos o múltiples en cierto intervalo de valores de flujos entrantes para el gasificador de flujos concurrentes de biomasa y en general para otros combustibles sólidos diferentes al carbón.

Recientemente, los estudios realizados sobre reactores de gasificación de biomasa de flujos concurrentes han eludido el problema de elucidar la estabilidad y multiplicidad de estados estacionarios en su comportamiento, enfocándose en la evaluación de la sensibilidad paramétrica y su influencia en el desempeño estático (Di Blasi, 2000, 2004; Rogel y Aguillon, 2006; Grieco y Baldi, 2011), así como en la caracterización del tiempo de asentamiento de la respuesta transitoria a una entrada escalón en los flujos entrantes de aire y biomasa (Gobel *et al.*, 2007) a lazo abierto mediante experimentos y modelos dinámicos en parámetros distribuidos que: (i) constituyen variaciones y/o refinamientos de los modelos unidimensionales desarrollados en las décadas de los 1980's y 1990's, y (ii) proveen descripciones cuantitativas de los datos experimentales. Entre los refinamientos están: un número mayor de componentes y reacciones (pirólisis en dos o más etapas con cinéticas de reacción finitas y modelada por separado como un proceso independiente de las reacciones de combustión), hipótesis de estado cuasi-estacionario (QSS) de la fase gas, equilibrio térmico entre fases, dependencia radial (adicional a la coordenada axial) de las temperaturas y concentraciones en un modelo bidimensional, y el uso de herramientas y conceptos de dinámica de fluidos computacional (DFC).

Estas investigaciones han proporcionado un conocimiento amplio sobre algunos aspectos fundamentales del comportamiento de gasificadores que permitió mejorar el desempeño de la siguiente generación de reactores de gasificación de lecho móvil caracterizados por un mejor aislamiento, inyección de aire en múltiples ubicaciones axiales (gasificador de múltiples etapas), extracción continua de carbonizado y cenizas no convertidas, así como por un sistema

de agitación continua de la rejilla y el lecho. En consecuencia, se incrementó la capacidad del gasificador, es decir, el intervalo de flujos del aire que garantizan una operación en estado estacionario estable con una producción de gas de síntesis de calidad aceptable y por lo tanto, su razón de apagado, la cual está definida como la razón del flujo de gas de síntesis efluente máximo entre el flujo efluente mínimo antes de que el reactor se extinga en estado estacionario, es decir, con flujos de entrada constantes.

Sin embargo, a pesar de que se ha dedicado un esfuerzo significativo de modelado y experimentación para mejorar el diseño del equipo, operación y monitoreo de gasificadores de lecho móvil, algunos problemas fundamentales relacionados con la operación en estado estacionario y dinámica (por cambios en la demanda del producto) han sido resueltos sólo de forma parcial, entre los cuales se encuentran los siguientes:

- Reducción eficiente de los componentes no deseados (alquitranes en el caso de biomasa) producidos tanto en régimen permanente como en condiciones transitorias, como el encendido y los cambios de demanda.
- Rango de operación en estado estacionario estable muy limitado con respecto a los flujos entrantes para aplicaciones de generación de energía de mediana y gran escala. La razón de apagado constituye un indicador importante de la robustez del gasificador debido a que relaciona los flujos entrantes del reactante gaseoso mínimo y máximo antes que el reactor cambie significativamente su desempeño o se extinga.
- Determinación del punto de operación (estado estacionario) óptimo.
- Bloqueos en el sistema de alimentación que induce inestabilidad en la operación.
- Flujo de partículas sólidas ineficiente dentro del reactor debido al derretimiento y bridging de cenizas que puede llevar a incrementos considerables en la presión del reactor.

La mayoría de estos problemas pueden ser abordados mediante modelos que describan los fenómenos no lineales subyacentes relacionados con la estabilidad local del proceso termoquímico. En este sentido el enfoque de los estudios de modelado a la fecha de reactores de gasificación ha sido limitado en términos del análisis de características fundamentales como la multiplicidad y estabilidad de sus estados estacionarios y las bifurcaciones asociadas, debido principalmente a la complejidad de los modelos propuestos y a la falta de datos experimentales suficientes para validar el comportamiento dinámico no local de esta clase de reactores.

1.1. Motivación.

Los reactores tubulares de gasificación son sistemas de procesos de parámetros distribuidos autotérmicos no lineales, cuyo desempeño está determinado por las interacciones entre procesos físico-químicos endotérmicos y exotérmicos de múltiples escalas de tiempo y espacio, así como por la estabilidad y la posible multiplicidad de sus estados estacionarios.

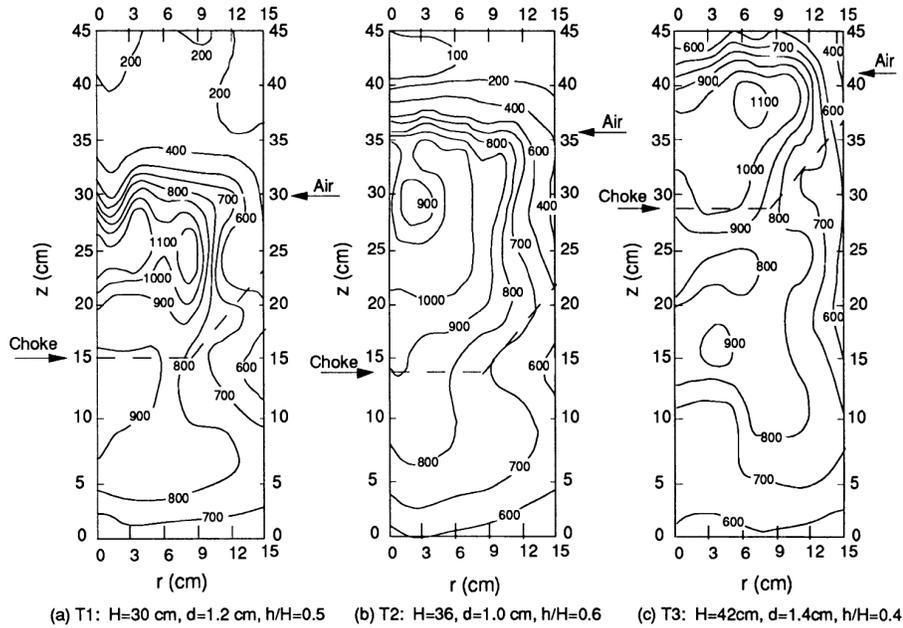


Figura 1.1: Distribución experimental axial y radial de temperatura en un gasificador de biomasa caracterizada por Wang y Kinoshita (1993).

La naturaleza distribuida y compleja de los reactores de gasificación se evidencia especialmente en el estudio de Wang y Kinoshita (1993) en el que se obtuvo experimentalmente los perfiles radiales y axiales de temperatura en estado estacionario para un reactor de lecho empacado de flujos concurrentes de biomasa mediante un arreglo de 10×10 sensores ubicados uniformemente (figura 1.1).

En consecuencia, esta clase de reactores son estudiados mediante modelos eulerianos unidimensionales y bidimensionales de dos fases termodinámicas constituidos por ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) de conservación de masa y energía principalmente, empleando diferencias finitas, elemento finito y paquetes de DFC para su discretización y simulación numérica. Los modelos subyacentes son sistemas dinámicos en parámetros concentrados de alto orden con rigidez numérica considerable y alta sensibilidad paramétrica características que afectan significativamente el desempeño de su simulación numérica limitan su aplicación en el diseño de esquemas de control y observación debido a que inducen un sistema de ecuaciones algebraicas de gran escala (1000-10000 ecuaciones) mal condicionado. Tal rigidez y complejidad de dichos modelos se debe a la ausencia de hipótesis de estado cuasi-estacionario

para la fase gas (Baldea y Daoutidis, 2007) principalmente, y a que no se explotan conceptos de la teoría de redes de reacción (Aris, 1965; Feinberg, 1977) para reducir el número de ecuaciones no lineales del modelo.

Adicionalmente, el diseño de leyes de control basadas en un modelo con parámetros distribuidos es una tarea compleja y cuya efectividad ha sido demostrada sólo para sistemas dinámicos donde los modelos están bien establecidos como estructuras mecánicas de gran escala (edificios). Sin embargo, sistemas dinámicos termoquímicos, como los gasificadores de lecho empacado, donde los fenómenos de transporte como convección y dispersión están acoplados con reacciones químicas y fenómenos de transferencia de calor dan lugar a modelos con alta incertidumbre y sensibilidad paramétrica, haciendo inapropiado desarrollar un controlador basado en un modelo distribuido para esta clase de sistemas.

Por otra parte, a pesar de que el problema de la multiplicidad y estabilidad de estados estacionarios y los fenómenos de histéresis asociados del proceso de gasificación de carbón ha sido ampliamente estudiado a nivel de partícula (Arri y Amundson, 1978), éste ha sido abordado de forma parcial mediante modelos distribuidos macroscópicos a nivel de reactor para un gasificador de flujos en contracorriente presurizado (Amundson y Arri, 1978; Caram y Fuentes, 1982) y no está claro en que medida dichos resultados son aplicables a los reactores de flujos concurrentes con otros combustibles de entrada (biomasa, coque de petróleo, residuos sólidos).

Estudios previos extensivos (Varma y Amundson, 1972, 1973a,b) muestran que los reactores tubulares exotérmicos de una reacción y una componente química pueden presentar multiplicidad de hasta 5 estados estacionarios (3 estables y 2 inestables) y los correspondientes fenómenos de histéresis para un conjunto de parámetros con relevancia física (una dispersión típica de $Pe_H = Pe_M = 5$), es decir, un subespacio factible del espacio completo de parámetros del modelo distribuido.

Por otro lado, de acuerdo al esquema de modelado clásico de ingeniería de reactores (Deans y Lapidus, 1960; Levenspiel, 1962) es posible representar el comportamiento de un reactor tubular vacío o de lecho empacado con dispersión mediante una serie de N reactores continuos de tanque agitado (RCTAs) con cierto grado de retro-mezclado, facilitando análisis de estabilidad y multiplicidad de estados estacionarios (Deckwer, 1974). La efectividad de este método de modelado para reproducir el comportamiento no lineal de reactores tubulares exotérmicos con un tren de un número pequeño de RCTAs ha sido demostrada en estudios de modelado (Sinkule *et al.*, 1974; Deckwer, 1974), así como, en estudios recientes de modelado y control de reactores tubulares exotérmicos con dispersión axial (Najera, 2012). En particular, Deckwer (1974) describe el comportamiento dinámico y estático experimental con una precisión similar al del modelo distribuido con dispersión axial ($Pe_H = 5$) y captura la multiplicidad de 3 estados estacionarios de un reactor tubular de lecho empacado exotérmico con un tren de $N = 10$ RCTAs con volúmenes idénticos. Najera (2012) captura con estabilidad estructural con respecto a N para $N > 3$ la multiplicidad de hasta 5 estados estacionarios de un reactor tubular exotérmico con un subconjunto de parámetros de Varma y Amundson (1973b).

El desarrollo de un modelo dinámico con estructura simple y sentido físico de primeros

principios, capaz de reproducir fielmente las características no lineales esenciales del proceso juega un papel central para el diseño de equipo, sistemas de control y observadores, como se demuestra en el estudio de Najera (2012), en el que se explota la estructura de un tren de 3 RCTAs con retro-mezclado para: (i) abordar el problema de diseñar un control no lineal robusto y pasivo para estabilizar un estado estacionario inestable a lazo abierto y (ii) diseñar una ubicación de sensor de temperatura (antes del punto máximo del perfil espacial de temperatura) para control y monitoreo congruente con lo estrategia seguida por la industria y estudios previos relacionados.

Estas consideraciones motivan el objetivo y la hipótesis de la presente investigación formulados en lo sucesivo.

1.2. Objetivo general.

Desarrollar un método de diseño de modelos dinámicos en parámetros concentrados de orden reducido con sentido físico, estructura simple y ajustable capaces de capturar características fuertemente no lineales como la multiplicidad y bifurcación de los estados estacionarios de una clase de reactores tubulares de gasificación con un grado de precisión determinado por el propósito de modelado específico a la luz de la incertidumbre significativa presente en esta clase de sistemas.

La generalidad del esquema de modelado propuesto permite su aplicación para distintos fines: análisis no lineal de estabilidad, multiplicidad y bifurcaciones de estados estacionarios, diseño de equipo, de experimentos, así como, síntesis de esquemas de estimación y control.

1.3. Hipótesis.

Es plausible deducir un método que proporcione modelos dinámicos en parámetros concentrados con sentido físico basado en primeros principios, estructura simple y orden reducido mínimo que describan el comportamiento no lineal de gasificadores de lecho empacado móvil con precisión mínima requerida por el objetivo de modelado y tomando en cuenta la incertidumbre presente en esta clase de reactores. Dichos modelos permitirán elucidar la estabilidad y multiplicidad de estados estacionarios, diseñar experimentos, equipo, esquemas de control y estimación para reactores de lecho empacado de gasificación.

Cabe señalar que esta hipótesis y todas las suposiciones metodológicas usadas en esta tesis están basadas en una idea fundamental de la teoría de control constructivo (Sepulchre *et al.*, 1997; Krstic *et al.*, 1995): la selección del modelo en sí constituye un grado de libertad a diseñar que puede ser efectivamente explotada para desarrollar tanto observadores no lineales como controladores avanzados y convencionales para RCTAs (Lopez y Alvarez, 2004; Diaz-Salgado *et al.*, 2012; Schaum *et al.*, 2012), sistemas distribuidos de secado (Martinez-Vera *et al.*, 2010), y sistemas por etapas (Castellanos-Sahagun *et al.*, 2006; Fernandez *et al.*, 2012).

1.4. Contribuciones.

La principal aportación de esta tesis consiste en establecer la factibilidad de (i) describir el comportamiento estático y dinámico con una precisión prescrita por el objetivo de modelado, (ii) explicar y completar la descripción de características no lineales como la multiplicidad y bifurcación de estados estacionarios reportadas en estudios previos experimentales y de simulación de reactores de gasificación de lecho empacado mediante un modelo dinámico no lineal en parámetros concentrados de orden reducido y estructura simple, específicamente, un sistema de pocas ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) no lineales de primer orden con matriz Jacobiana de estructura tridiagonal a bloques.

Un modelo considerablemente más simple que los propuestos en la literatura de gasificadores se logra mediante la aplicación concurrente de dos esquemas de reducción de orden que conforman el método de modelado propuesto (Badillo-Hernandez *et al.*, 2013): (i) suposición de estado cuasiestacionario para la fase gas basada en métodos de perturbaciones singulares, y (ii) representación del reactor mediante una conexión en cascada con retro-mezclado del menor número posible (N) de RCTAs en función del objetivo de modelado. La aplicación del método en el caso de estudio representativo lleva a poder capturar el comportamiento dinámico y estático alrededor de un estado estacionario de interés práctico mediante un modelo simple de un tren de 3 RCTAs de diferente volumen, constituido por 9 ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) y con precisión similar a la obtenida por los modelos estándar de alto orden de la literatura con 1800 a 7000 EDOs.

Se realiza un análisis basado en teoría de bifurcaciones del efecto del flujo entrante de aire en el comportamiento estático y dinámico de un conjunto de modelos de N -RCTAs del gasificador de biomasa a la luz de la incertidumbre del coeficiente de dispersión térmico. Las diferencias de los mecanismos de transporte considerados en las correlaciones de la conductividad térmica efectiva empleadas en la literatura motivaron el estudio de caracterización de García Anaya (2014), el cual guió la variación de la dispersión térmica en este análisis no lineal. Los resultados del presente análisis mostraron que:

1. Se captura y completa con estabilidad estructural para $N \geq 3$ y un retro-mezclado correspondiente a un número de Peclet térmico $Pe_H < 2.5$ el diagrama de bifurcación en relación al flujo de aire entrante del reactor de flujos paralelos descendentes del caso de estudio. Éste puede exhibir multiplicidad de hasta 5 estados estacionarios, de los cuales 3 son estables y que son cualitativamente similares a los dos perfiles estacionarios con frentes de reacción ubicados en dos posiciones axiales distintas a lo largo del reactor y al estado trivial de extinción, reportados en estudios previos (Reed y Markson, 1985; Milligan, 1994; Shwe, 2004).
2. El nivel de retro-mezclado o el Pe_H correspondiente necesario para describir con estabilidad estructural el comportamiento no lineal del gasificador de biomasa coincide con el grado de dispersión térmica típico que se observa experimentalmente en reactores de lecho empacado similares de acuerdo al estudio de García Anaya (2014).

En la literatura, el efecto de la multiplicidad sobre el comportamiento estático ha sido tratada sólo de forma parcial en dos estudios clásicos de gasificadores de carbón de flujos en contracorriente (Amundson y Arri, 1978; Caram y Fuentes, 1982), mientras que la estabilidad no ha sido abordada formalmente debido a la complejidad de los modelos. En el caso de los gasificadores de biomasa de flujos paralelos no existen estudios que aborden el problema de la estabilidad y multiplicidad de los estados estacionarios.

La segunda contribución consiste en identificar el papel fundamental que tienen el retromezclado o la dispersión térmica en la predicción adecuada de la estabilidad relativa (robustez del desempeño) del proceso de gasificación con independencia del tipo de modelo desarrollado, sea éste el modelo de N -RCTAs o el modelo distribuido respectivamente. En consecuencia, se debe poner énfasis en el modelado y validación experimental de coeficientes de dispersión térmica (o de conductividad térmica efectiva) de este tipo de reactores con el objetivo de aprovechar las ventajas que ofrecen los modelos diseñados con el método propuesto y a su vez, evitar conclusiones erróneas e irreales acerca del comportamiento dinámico de gasificadores.

1.5. Organización de la tesis.

Con el objetivo de facilitar la lectura y la comprensión de la diversidad de aspectos que se abordan, el contenido de la presente tesis se estructura de la siguiente forma:

- El planteamiento del problema de modelado se establece en el capítulo 2. Primero se aborda la relación del problema de modelado con los problemas de la ingeniería de control. Después, se presenta una revisión del estado del arte de modelado, sus alcances y limitaciones. Posteriormente se describe el punto de partida del método propuesto: modelo dinámico en parámetros distribuidos de reactores de gasificación tubulares de lecho empacado móvil, así como, la descripción del caso de estudio que se propone para evaluar e ilustrar el esquema desarrollado en esta tesis.
- En el capítulo 3, un conjunto de conceptos y herramientas de teoría de redes de reacción son aplicados al modelo distribuido de reactores de gasificación de lecho empacado con el objetivo de obtener una representación simplificada, aislando las no linealidades provenientes del término de reacción en un número mínimo de ecuaciones. Se realiza un análisis algebraico basado en la estequiometría del reactor con el que se determina el conjunto de reacciones independientes. Posteriormente se deduce la forma reactiva-no reactiva de los balances de masa del reactor mediante un método robusto y óptimo. El análisis estequiométrico previo es ilustrado en el caso de estudio.
- En el capítulo 4 se aplican métodos de reducción de orden y simplificación basados en la teoría de perturbaciones singulares al modelo distribuido general del reactor de gasificación del capítulo 2.

- El problema de aproximar el comportamiento del modelo generalizado de dimensión infinita de gasificadores presentado en el capítulo 2 mediante un modelo de dimensión finita reducida se aborda en el capítulo 5. La primera sección presenta una revisión de métodos de agregación (lumping) de modelos distribuidos. El punto de partida de la sección es el método clásico de agregación de ingeniería de reactores químicos, en el que el comportamiento de un reactor tubular puede ser aproximado con precisión arbitraria mediante un tren de N -RCTAs. Posteriormente, se aborda el problema de representar el modelo distribuido de orden reducido del gasificador de lecho móvil como un tren de N -RCTAs con retro-mezclado y diferente volumen (anisocórico) mediante un método de discretización simple: diferencias finitas de primer orden.
- El método de diseño de modelo se desarrolla en el capítulo 6. Se integran el conjunto de estrategias de modelado presentadas en los capítulos 3, 4 y 5 en el modelo de dimensión infinita de gasificadores de lecho móvil para representarlos como un tren de N -RCTAs con retro-mezclado, y estructura adaptable (N, V_k). Se proporcionan una serie de reglas con base física para seleccionar N y V_k . Finalmente, se evalúa el método de diseño de modelo en el caso de estudio representativo.
- Un análisis del comportamiento dinámico y estático no lineal del gasificador de lecho móvil es realizado en el capítulo 7. Se caracterizan los fenómenos no lineales que exhiben esta clase de reactores a la luz de estudios de simulación numérica y experimentales. Se formula el problema y se da una descripción general de los métodos de análisis de sistemas dinámicos no lineales basados en teoría de bifurcaciones. Se realiza un estudio de bifurcaciones en los modelos de N -RCTAs del caso de estudio para analizar la dependencia de las soluciones estacionarias con respecto a parámetros de importancia operacional como los flujos entrantes y coeficiente de dispersión (o retro-mezclado). Posteriormente se presentan simulaciones numéricas del comportamiento dinámico bajo diferentes condiciones de operación de interés y se deducen propiedades no locales de los equilibrios (estados estacionarios) como la estabilidad y multiplicidad.
- Finalmente, se enumeran las conclusiones del presente estudio consolidando tanto los alcances como las limitaciones de la propuesta metodológica de modelado y sus implicaciones para diseño y análisis de esquemas de control, estimación y diseño de experimentos, así como, un conjunto de recomendaciones para el trabajo futuro.

Capítulo 2

Planteamiento del problema de modelado.

El presente capítulo está dedicado a definir los aspectos fundamentales que sustentan el marco de modelado de orden reducido que se desarrollará en las siguientes partes de esta tesis. Primero, se describe la importancia del problema de modelado en la disciplina de control automático de procesos, seguida de las características principales del tipo de reactores de gasificación que se estudiará, seguido de un panorama general de los estudios de modelado más relevantes para los propósitos de modelado perseguidos en este trabajo. Posteriormente, se exponen los conceptos de ingeniería de reactores que constituyen los antecedentes metodológicos del esquema de diseño de modelo desarrollado en la presente tesis. Después, basado en dichos conceptos, se propone el modelo generalizado de transporte con dispersión de masa y energía que incorpora los aspectos comunes a todos los modelos de gasificadores de lecho empacado desarrollados recientemente. El sistema dinámico en parámetros distribuidos resultante es el punto de partida del método de diseño de modelo propuesto. Finalmente, se enuncia el problema de modelado que se pretende resolver y se exhiben los aspectos más significativos del caso de estudio al cual se aplicarán las diferentes herramientas y conceptos del método de modelado desarrollado.

2.1. Relevancia en la ingeniería de control.

En la presente sección se enfatiza la importancia de la elección de un modelo con un buen compromiso entre complejidad y precisión en el desarrollo de las diferentes etapas de diseño de controladores y observadores de sistemas de procesos de gran escala, sean estos distribuidos y/o de varias etapas.

Dada la complejidad intrínseca de sistemas de procesos como los reactores de gasificación, el desarrollo de sistemas de control y monitoreo de su operación consta de tres etapas principales (Skogestad y Postlethwaite, 2005):

- *Formulación del objetivo de control/estimación.* Estimación o control del perfil

espacial completo discreto o continuo de concentraciones y/o temperaturas o sólo de valores efluentes con un grado precisión determinado o rechazo de perturbaciones y regulación, robustez, velocidad de convergencia, etc.

- **Diseño de la estructura de control/observación.** La elección de la estructura del controlador implica tres puntos de decisión:
 1. *Variables de salida a controlar para lograr el objetivo de control.*
 2. *Variables a medir y variables a manipular en el sistema de procesos.* Criterio de colocación de sensores y actuadores (número y ubicación) basado en medidas de sensibilidad de un modelo del sistema.
 3. *Configuración de control.* Comprende la elección del grado de interacción de las mediciones, señales de referencia o comandos y señales manipuladas (descentralizada, diagonal a bloques o completa) basado en una noción de controlabilidad específica.

El diseño de la estructura del observador implica la selección de tres componentes básicos:

1. *Mediciones en el sistema de procesos.* Criterio de colocación simple de sensores (número y ubicación) de temperatura a lo largo del gasificador para lograr el objetivo de estimación.
 2. *Modelo completo o reducido (truncado) del proceso.* Es deseable la elección de un modelo con un buen compromiso entre la complejidad del mismo (dimensión de modelo) y su nivel de detalle (precisión).
 3. *Configuración de la estructura de innovación.* Comprende la elección del grado de interacción de las mediciones con los estados del modelo (descentralizada, diagonal a bloques o completa) basado en una noción de observabilidad.
- **La ley o algoritmo de control/estimación.** La ley de control se encarga del procesamiento que integra la información proveniente de los sensores y señales de referencia de acuerdo a la configuración de control para determinar el valor que deben tomar las variables manipuladas y efectuar dichas acciones de control mediante los actuadores. El algoritmo de estimación procesa las señales de los sensores, comandos y de las variables manipuladas y las integra al modelo del proceso de acuerdo a la configuración de estimación con el objetivo de reconstruir el estado del sistema de procesos.

Además, debido a las necesidades de información de variables difíciles de medir del proceso que tienen con frecuencia los sistemas de control, su desempeño está vinculado con las capacidades de predicción del observador o estimador diseñado para este propósito.

El buen funcionamiento de un estimador depende en gran parte de una elección adecuada de la estructura de estimación en sistemas de procesos de gran escala (Lopez y Alvarez, 2004).

Bajo esta visión, dado un objetivo de estimación, un aspecto clave en el diseño de un estimador es el compromiso entre la complejidad del modelo y su precisión ya que afectará la complejidad del diseño del resto de las componentes de la estructura. De esta manera, un modelo con bajo nivel de detalle proveerá poca información sobre el proceso y será necesario incrementar el número de sensores, proponer una configuración de innovación con mayor interacción y/o seleccionar una ley de estimación con mejor desempeño. Por el contrario, un modelo con alto grado de detalle y/o un mecanismo de innovación complejo (interactivo y en todo el modelo), añadirá información redundante del proceso al estimador con un alto costo computacional y esfuerzo de modelado.

Dos estudios recientes demuestran lo anterior utilizando un mecanismo de innovación no interactivo:

1. (Fernandez *et al.*, 2012) La composición de los dos efluentes de una columna binaria de destilación de 12 etapas de agua y metanol fue estimada sólo con dos mediciones de temperatura y un modelo reducido de 5 estados y un mecanismo de innovación no interactivo.
2. (Frau *et al.*, 2010) La composición de los dos efluentes de una columna de destilación con 6 componentes y 37 etapas fue estimada sólo con dos sensores de temperatura y un modelo reducido de 57 estados obteniendo un desempeño comparable al de su contraparte basada en filtro extendido de Kalman con 2849 EDOs.

Bajo este esquema general resulta evidente la estrecha relación entre el desarrollo de una estrategia de control y estimación y el modelo del proceso, por lo que el punto de partida metodológico de esta investigación está fundamentado en la idea de que la selección de un modelo con complejidad mínima necesaria es un grado de libertad fundamental de diseño que puede ser explotado para sintetizar observadores y controladores.

Por otra parte, una característica fundamental que limita el desempeño alcanzable de un sistema de control y monitoreo del proceso es la sensibilidad del modelo a parámetros de entrada, la cual está directamente vinculada con las diferentes escalas de tiempo de los procesos físico-químicos modelados (convección, difusión, reacciones rápidas de combustión, reacciones lentas de reducción, transferencia de calor rápida, etc.). Los modelos dinámicos de gasificadores basados en primeros principios son por lo tanto sistemas de EDPs con alto grado de rigidez. En consecuencia, resulta necesario el diseño de un modelo de orden reducido que describa el desempeño de una clase de reactores de gasificación con un grado de sensibilidad y precisión adecuados en términos del objetivo específico de modelado, así como, de la incertidumbre del modelo y experimentos.

2.1.1. Problemas de control y optimización.

Entre los problemas de control más importantes para la operación de reactores de gasificación se cuentan los siguientes:

- **Regulación de hot spot o temperatura máxima.** Debido a la naturaleza exotérmica del proceso, la temperatura máxima del reactor no puede ser mayor que la de la flama adiabática de la reacción de oxidación más fuerte. Sin embargo, usualmente se requiere que la temperatura máxima sea mucho menor a la adiabática a fin de evitar un desgaste prematuro de las paredes del reactor, así como el punto de derretimiento de las cenizas. Este problema es común a todos los tipos de gasificadores.
- **Regulación de concentración de contaminantes en gas de síntesis.** De acuerdo a la región de operación termodinámica e hidrodinámica un gasificador produce una cantidad significativa de productos no deseados de distintos tipos: Óxidos de Carbono(CO_2), Óxidos de Azufre(SO_x), Óxidos de Nitrogeno(NO_x) y Alquitranses líquidos producto de la pirólisis. Este problema también es conocido como control de la calidad del gas de síntesis.
- **Regulación del valor calórico del producto y eficiencia energética del proceso.** En la literatura (Karppanen, 2000) se ha reportado que se observan fluctuaciones importantes en el valor calórico del gas de síntesis debido a cambios en el contenido de humedad y cenizas del combustible sólido. Estas fluctuaciones afectan la eficiencia energética del proceso, por lo que es necesario diseñar un controlador robusto a estas perturbaciones.
- **Regulación y seguimiento de flujo másico de gas de síntesis con reducción del tiempo de respuesta.** Cuando la demanda del producto del proceso (gas de síntesis) es modificada por el usuario los flujos entrantes de aire y combustible sólido son modificados para cumplir (seguimiento) con dicha demanda, sin embargo, el tiempo de respuesta del reactor suele ser de hasta 12 horas incluso en equipos de pequeña escala por lo que es necesario reducirlo.

Los objetivos de optimización que es posible formular con relación al desempeño en estado estacionario y en condiciones transitorias de operación de esta clase de reactores se enumeran a continuación :

- **Maximización de la calidad del gas de síntesis.** Está relacionado con la cantidad de productos no deseados en el proceso de gasificación.
- **Maximización de la eficiencia energética del proceso.** La eficiencia energética de este tipo de reactores está definida por el valor calórico del combustible sólido entrante y del gas de síntesis.
- **Maximización de la producción de un componente deseado.** En diversas aplicaciones industriales se suele favorecer la producción de un componente: Hidrógeno, Vapor de Agua ó Metano.
- **Maximización de la conversión del combustible sólido.** Una forma de incrementar la eficiencia del proceso es lograr una conversión máxima del reactante sólido.

2.1.2. Problemas de estimación o predicción.

El desempeño de un gasificador depende del valor de las concentraciones de las múltiples componentes gaseosas y sólidas a lo largo del reactor cuya medición resulta costosa, difícil de implementar en línea y con alta incertidumbre experimental. Aún si el avance tecnológico en dispositivos de medición de concentración fuera tal que eliminara las dificultades anteriores y fuera entonces posible medir todas las concentraciones en varias ubicaciones axiales a lo largo del reactor surgen dos problemas fundamentales: (i) procesar una gran cantidad de información proveniente del gran número de sensores en un corto tiempo para su presentación en un sistema de monitoreo o uso en un sistema de control, y (ii) la relevancia o importancia relativa de dicho cúmulo de información, es decir, distinguir entre información esencial e información redundante en función de un objetivo dado.

Los problemas enunciados anteriormente pueden ser resueltos mediante un observador o estimador, el cual es un sistema dinámico procesador de información que infiere el estado del proceso de acuerdo a un objetivo de estimación combinando dos fuentes de información: un conjunto de mediciones y un modelo matemático del proceso (TASC, 1974). De acuerdo a esta definición amplia, encontramos dos paradigmas extremos de observación:

1. **Observador de lazo abierto.** Es un observador que no toma mediciones del proceso y por lo tanto está constituido exclusivamente por el modelo de la planta. Por lo tanto, los errores de estimación deben ser corregidos por un esfuerzo de modelado significativo.
2. **Observador de lazo cerrado.** Corrige los errores de estimación del modelo mediante la inyección de un número adecuado de mediciones en todo o en parte del modelo.

Adicionalmente, el diseño de sistemas de control a menudo supone que todas las variables de estado del sistema de procesos se pueden medir y por lo tanto, requiere información en tiempo real de variables de concentración, las cuales son difíciles de medir por las razones expuestas anteriormente.

Debido a lo anterior, es necesario diseñar un estimador u observador (sensor de software) capaz de deducir las concentraciones de los componentes del reactor a partir de un número limitado de mediciones de temperatura a lo largo del gasificador y el conocimiento de la dinámica de las variables medidas (temperatura), así como de las variables de estado a estimar a través de un modelo dinámico del sistema.

2.2. Clase de reactores de gasificación modelados.

Este estudio se enfoca en el reactor continuo de gasificación tubular de lecho móvil (mostrado en la figura 2.1) en el que la conversión de un combustible sólido en uno gaseoso se lleva a cabo de acuerdo a una red de reacciones multicomponente en las dos fases: sólido y gas. Existen dos subtipos básicos de esta clase de gasificadores diferenciados por el flujo



Figura 2.1: Gasificador tubular de lecho empacado de flujos descendentes.

de la fase gaseosa relativo al sólido: concurrentes (paralelos) en operación descendente y en contracorriente ascendente.

Se alimentan al reactor dos flujos: uno con las partículas del combustible sólido (carbón mineral, biomasa o residuos sólidos municipales), las cuales son mono-dispersas (mismo tamaño y forma), y otro con el agente gasificante (aire, oxígeno puro, vapor de agua o una mezcla de ellos) en la parte inferior (ascendente) o en la parte superior (descendente). El reactor es equipado con dos flujos efluentes principalmente: uno con las partículas sólidas sin reaccionar, y el otro con el producto (gas combustible) en la parte inferior (descendente) o en la parte superior (ascendente). El flujo del agente gasificante puede estar localizado en el fondo o en la cima del reactor. Sin perder generalidad, el presente estudio se limita al caso de operación con flujos entrantes paralelos y descendentes.

Las principales diferencias entre las operaciones ascendente y descendente son:

- El orden de ocurrencia de las zonas de combustión y reducción está invertido en el contracorriente con relación al descendente de flujos paralelos.
- La influencia de la zona de pirólisis en la composición del producto es mayor en el gasificador a contracorriente que en el de flujos concurrentes produciendo éste último un gas de síntesis más limpio.
- El fenómeno de transporte por reflujos (o retro-mezclado) implícito de calor y masa

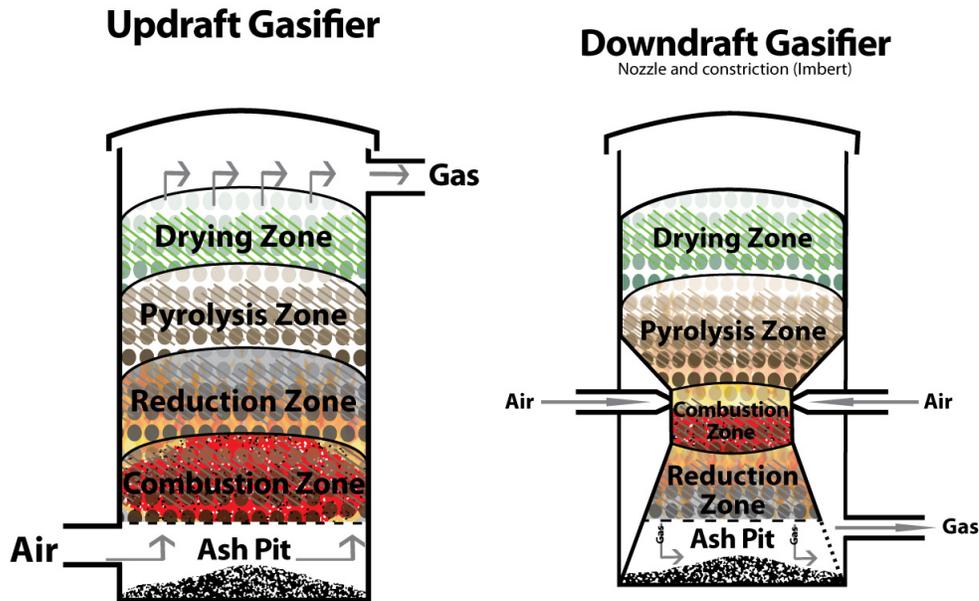


Figura 2.2: Gasificadores tubulares de lecho empacado de flujos en contracorriente (izquierda) y de flujos paralelos (derecha) All-Power-Labs (2012).

determina la estabilidad y desempeño del gasificador en contracorriente, mientras que el flujo pistón de masa parece dominar en el tipo concurrente.

2.3. Estado del arte de modelado de gasificadores de lecho empacado.

La primeros estudios extensivos (Amundson y Arri, 1978), (Caram y Fuentes, 1982) pusieron énfasis en entender el comportamiento estático y la sensibilidad paramétrica del proceso de gasificación de carbón. El primer grupo dedujo un modelo en estado estacionario no lineal considerando sólo la dependencia axial espacial de las temperaturas y concentraciones de las dos fases del reactor. Mientras que el segundo obtuvo un modelo simplificado de la estática del proceso con énfasis en los balances de energía de cada fase. La simulación numérica mediante diferencias finitas realizada por (Amundson y Arri, 1978) y la solución analítica del conjunto de modelos lineales deducidos por (Caram y Fuentes, 1982) permitieron establecer que el reactor de lecho empacado presurizado (20-24 atm) con flujos a contracorriente tipo Lurgi exhibe el siguiente comportamiento:

- Alta sensibilidad paramétrica con respecto a los flujos de alimentación.
- Multiplicidad de hasta cuatro conjuntos de perfiles espaciales en estados estacionario estables para un cierto intervalo de valores del flujo entrante de sólido.

- Un frente de flama viajero en operación dinámica.
- El estado estacionario de operación óptimo se encuentra en la región de multiplicidad de estados estacionarios a lazo abierto y posiblemente sea inestable (Amundson y Arri, 1978) por razones fundamentales:
 - La cantidad de calor provista por la combustión en el estado estacionario con reacción estabilizada en la cima es mayor a la requerida para gasificar la totalidad del carbonizado por lo que se produce una capa de cenizas grande fuera de la región de multiplicidad.
 - La conversión del estado estacionario con reacción estabilizada en el fondo es baja fuera de la región de multiplicidad.
 - La temperatura máxima que se alcanza en la zona de cenizas es cercana a su punto de derretimiento.

Algunas características de dicho comportamiento fueron corroboradas experimentalmente en estado estacionario (Milligan, 1994; Manurung y Beenackers, 1993; Reed *et al.*, 1999) y en condiciones dinámicas de operación (Reed y Markson, 1985; Barrio *et al.*, 2001; Shwe, 2004) para el gasificador estratificado de flujos paralelos descendentes de biomasa. En particular, (Reed y Markson, 1985), (Milligan, 1994) y (Barrio *et al.*, 2001) reportaron que: (i) hasta tres modos de operación en estado estacionario estables son posibles bajo ciertas condiciones de alimentación, cuyas propiedades son cualitativamente similares a las de los perfiles estacionarios estables del reactor en contracorriente, (ii) la altura del lecho de carbonizado es la variable con el tiempo característico más largo del proceso ante cambios en la demanda de producto gaseoso, (iii) el reactor muestra un frente de reacción móvil semejante al de una flama de combustión viajera, y (iv) la operación óptima en estado estacionario del reactor sólo se presenta para un rango de valores reducido de flujos entrantes. En vista del análisis de (Amundson y Arri, 1978), no es claro si los modos de operación en lazo abierto son únicos o múltiples en cierto intervalo de valores de flujos entrantes para el gasificador de biomasa de flujos concurrentes.

Recientemente, los estudios de simulación numérica realizados se han enfocado en la evaluación de la sensibilidad paramétrica, el desempeño estático y en algunas características de la dinámica del proceso de gasificación de biomasa (Di Blasi, 2000, 2004; Rogel y Aguillon, 2006), (Gobel *et al.*, 2007), (Grieco y Baldi, 2011) con modelos dinámicos en parámetros distribuidos que incorporan un número mayor de componentes y reacciones (pirólisis en dos o más etapas con cinéticas de reacción finitas), hipótesis de estado cuasi-estacionario (QSS) de la fase gas, dependencia radial (adicional a la coordenada axial) de las temperaturas y concentraciones, equilibrio térmico entre fases y el uso de herramientas y conceptos de DFC. Los modelos describen los datos experimentales de temperatura absoluta y concentraciones del gas efluente con desviaciones del 8 al 15 y del 5 al 12 %, respectivamente.

A pesar de que estos modelos son adecuados para diseño y rediseño del proceso, son de dimensión y rigidez numérica excesivamente altas debido a la ausencia de hipótesis de

estado cuasi-estacionario (Gobel *et al.*, 2007), y de partición de especies químicas reactivas y no reactivas basada en la estequiometría (Aris, 1965; Feinberg, 1977). A su vez, la disponibilidad de modelos de orden reducido debe: (i) facilitar estudios de características clave del comportamiento como la multiplicidad y estabilidad de estados estacionarios, y (ii) permitir el desarrollo de esquemas de monitoreo y control avanzados, en el entendido de que las teorías de estabilidad, estimación y control para sistemas de dimensión finita se encuentran mucho más desarrolladas que las correspondientes para sistemas de dimensión infinita.

Estas consideraciones motivan el enfoque metodológico de la presente tesis: el desarrollo de un marco de modelado de orden reducido para reactores tubulares de gasificación de lecho móvil que capture características esenciales no lineales como la estabilidad y multiplicidad de estados estacionarios, y las bifurcaciones asociadas.

2.4. Antecedentes del marco de modelado propuesto.

El objetivo de esta sección consiste en proveer una base metodológica al marco de modelado postulado en esta tesis a través de los conceptos de dispersión y retro-mezclado utilizados en el campo de la ingeniería de reactores clásica Levenspiel (1962) para modelar de forma simple aspectos complejos de la mecánica de los fluidos. Estas ideas son ilustradas en un modelo generalizado de fenómenos de transporte que unifica las leyes de conservación de momento, energía y masa (Bird *et al.*, 1960).

El desempeño de sistemas de procesos como los reactores químicos es determinado por dos factores principales: (i) la velocidad de reacción a la que se llevan a cabo los procesos, y (ii) el patrón de contacto de fluidos y sólidos que surge en su avance a través del reactor Levenspiel y Bischoff (1964). La diversidad de formas de flujo está delimitada por dos patrones ideales extremos: (i) flujo pistón o tubular sin retromezclado, y (ii) flujo perfectamente mezclado. En consecuencia, todos los patrones de flujo no ideales exhiben un determinado grado de mezclado. El equipo que desarrolla un flujo sin mezclado es el reactor tubular de flujo pistón, mientras que el mezclado perfecto se lleva a cabo en el reactor continuo de tanque agitado ideal.

El enfoque de ingeniería de reactores químicos consiste en evaluar cuál de los dos reactores ideales ofrece una operación óptima en relación a la aplicación específica deseada y con base en ello, diseñar el equipo de procesos de forma que se desarrolle en su interior el patrón óptimo ideal Levenspiel (1999). Sin embargo, aunque un diseño apropiado del equipo reduce en gran medida patrones de flujo no ideales, diversos fenómenos físicos como la difusión molecular y turbulenta, así como, la viscosidad inherente a los fluidos producen un cierto grado de mezclado debido a las distribuciones de velocidades de flujo radiales y axiales. Entre los efectos no ideales de flujo comúnmente encontrados están la canalización, recirculación y zona muerta causada por regiones de estancamiento del material a procesar.

El artículo seminal de Danckwerts (1953) introdujo la teoría de tiempos de residencia, la cual constituye el fundamento de la mayoría de los métodos experimentales para determinar

el grado de mezclado en los reactores. Debido a las dificultades prácticas inherentes a la caracterización completa de los patrones de flujo, los métodos experimentales extraen información parcial del patrón de flujo a través de la distribución de los tiempos de residencia (DTR) de elementos del fluido en el reactor. Las curvas de DTR de un reactor capturan la esencia del patrón de flujo en la mayoría de los casos, y además son fáciles de interpretar y obtener por medio de experimentos de respuesta a estímulos con trazadores inyectados en la corriente de flujo del equipo.

Con el objetivo de analizar el efecto de los patrones no ideales de flujo en el desempeño de los reactores se han formulado una diversidad de modelos de flujo que aproximan de forma razonable y simple patrones de flujo reales, los cuales se pueden clasificar en dos tipos:

1. Modelos de dispersión. Realizan una analogía entre el grado de mezclado del flujo no ideal bajo estudio y un proceso de transporte difusivo. Estos modelos se forman al agregar los efectos no ideales de mezclado al modelo de flujo pistón mediante un término de difusión efectiva o dispersión.
2. Modelos de retomezclado. Dividen el reactor en regiones conectadas en serie o en paralelo incluyendo flujos de retomezclado entre ellas. El modelo de tanques (RCTAs) en serie o de celdas mezcladas de esta categoría ha sido extensamente utilizado en ingeniería química clásica Levenspiel (1962) para describir las desviaciones de sistemas reales como reactores de lecho empacado y RCTAs de las condiciones de flujo ideales que se atribuyen a estos equipos.

A la luz de estos conceptos de mezclado y dispersión de ingeniería de reactores químicos, todos los esquemas de modelado de sistemas de procesos basados en primeros principios se pueden formular a partir de una ecuación de transporte generalizada (2.1), de acuerdo al tratamiento unificado de los principios físicos de transferencia de momento, energía y masa Bird *et al.* (1960).

$$\underbrace{\partial_t \varphi}_{\text{Almacenamiento}} = \underbrace{-(\nabla \cdot \varphi \mathbf{U})}_{\text{Convección}} + \underbrace{(\nabla \cdot D \nabla \varphi)}_{\text{Dispersión}} + \underbrace{S(\varphi, \mathbf{r})}_{\text{Generación}} \quad (2.1)$$

donde ∂_t denota derivada parcial con respecto al tiempo t , φ es la variable o propiedad que se conserva por unidad de volumen, \mathbf{U} es el vector de las velocidades de flujo convectivo, D es el coeficiente de transporte por dispersión, S es el término fuente generalizado y \mathbf{r} es el vector tridimensional del sistema de coordenadas espaciales adoptado de acuerdo a la geometría del equipo, $\nabla \cdot$ y ∇ son los operadores de divergencia y gradiente en dichas coordenadas; por ejemplo, en el caso de equipos tubulares las coordenadas naturales son $\mathbf{r} = (Z, r, \theta)$ y $\nabla = (\partial_Z, \partial_r, \partial_\theta)$. De acuerdo a esta visión unificada, las ecuaciones de conservación de masa, energía y momento se generan a partir del balance generalizado (2.1). Es decir, el balance de masa se obtiene con $\varphi = \rho$, el balance de energía con $\varphi = \rho C_p T$ y el balance de momento con $\varphi = \rho \mathbf{U}$.

Cabe señalar que el ámbito de validez del modelo generalizado (2.1) es amplio, ya que es empleado para modelar tanto reactores homogéneos de una sola fase como a sistemas

de procesos que involucran múltiples fases termodinámicas. En el caso de reactores de gasificación en los que las fases gas y sólida fluyen de forma continua, se modela como un sistema heterogéneo de dos fluidos. De esta forma, la fase sólida se comporta como un fluido compuesto de partículas porosas de carbono.

En esta tesis se circunscribe el estudio al modelo unidimensional axial de dos fases, sin restringir la generalidad del marco de modelado desarrollado. Por lo tanto, el modelo de transporte unidimensional generalizado (2.2) produce los balances de masa, energía y momento que describen la variación axial y temporal de concentraciones, temperaturas y velocidades de flujo en cada fase termodinámica.

$$\underbrace{\partial_t \varphi_\pi}_{\text{Almacenamiento}} = -\underbrace{(\partial_Z \cdot u_\pi \varphi_\pi)}_{\text{Convección}} + \underbrace{(\partial_Z \cdot D_\pi \partial_Z \varphi_\pi)}_{\text{Dispersión}} + \underbrace{S_\pi(\varphi_\pi, \mathbf{r})}_{\text{Generación}}, \quad \pi = g, s \quad (2.2)$$

Cabe señalar que los modelos de transporte generalizados (2.1)-(2.2) son formulados en la escala macroscópica del sistema de procesos y tienen la misma estructura que los modelos microscópicos que incorporan convección y difusión de las especies en una mezcla. La diferencia yace en que la difusión de las componentes químicas en la escala microscópica se basa en leyes naturales exactas, mientras que el término de transporte dispersivo en el modelo macroscópico (2.2) incorpora varios fenómenos físicos que causan dispersión, como difusión molecular, turbulencia, distribución de tiempos de residencia a lo largo del reactor, entre otros. Así mismo, los efectos de las inhomogeneidades radiales en los equipos de procesos son promediados e incluidos a través del término de transporte dispersivo (Taylor, 1953).

La dispersión longitudinal axial en reactores de lecho fijo y de lecho fluidizado captura las fluctuaciones a pequeña escala de la velocidad de flujo que produce una distribución estadística de los tiempos de residencia del fluido interpretados como difusión por remolinos en contracorriente. De forma análoga, en un reactor tubular de una fase la dispersión es causada por un grado de turbulencia uniforme de origen mecánico. Por lo tanto, la dispersión solo modela fenómenos de flujo de naturaleza estadística, es decir, fluctuaciones elementales de la velocidad, concentración y temperatura que se repiten muchas veces a lo largo del reactor.

Desde el punto de vista de la ingeniería de reactores químicos, el coeficiente de dispersión axial D constituye un parámetro del modelo a determinar de acuerdo al tipo de lecho empacado del equipo, régimen de flujo (laminar, transición, turbulento), entre otras propiedades físicas del fluido. Por lo tanto, el grado de mezclado en el patrón de flujo de una corriente en un reactor es modelado mediante el coeficiente de dispersión D .

El modelo de dispersión axial generalizado unidimensional (2.2) constituye la base del esquema de modelado propuesto debido a que posee un buen compromiso entre simplicidad y precisión de predicción.

2.5. Modelo general en parámetros distribuidos del reactor.

Para el propósito de modelado perseguido, el presente estudio supone que la conversión de un combustible sólido a gaseoso se lleva a cabo de acuerdo a una red de reacción de m reacciones, n_π^R componentes reactivos, y n_π^I componentes inertes ($n_\pi = n_\pi^R + n_\pi^I$) en la fase termodinámica π (sólida o gaseosa), de acuerdo a la siguiente expresión en una forma general orientada a la estequiometría de acuerdo a la notación clásica de (Aris, 1965):

$$s_{1,j}^\pi \Omega_1^\pi + \dots + s_{n_\pi^R,j}^\pi \Omega_{n_\pi}^\pi = 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad \pi = g, s \quad (2.3a)$$

$$\mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad \Delta H_j$$

$$g = \text{gas}, \quad s = \text{sólido}$$

$$\mathbf{C}_\pi = [C_1^\pi, C_2^\pi, \dots, C_{n_\pi}^\pi]^T \quad (2.3b)$$

$$\mathbf{C} = [\mathbf{C}_g^T, \mathbf{C}_s^T]^T, \quad \mathbf{T} = [T_s, T_g]^T \quad (2.3c)$$

donde Ω_i^π es la i -ésima componente de la fase π , $s_{i,j}^\pi$ es el coeficiente estequiométrico del i -ésimo componente Ω_i^π en la j -ésima reacción de la fase π , \mathcal{R}_j es el j -ésimo función de velocidad de reacción, T_π es la temperatura de la fase π , ΔH_j es el cambio de la entalpía de la j -ésima reacción, \mathbf{C}_π es el vector con las concentraciones molares C_i^π (por unidad de volumen) del i -ésimo componente en la fase π , y \mathbf{C} es el vector de concentraciones de ambas fases. El presente esquema supone que las cinéticas \mathcal{R}_j son irreversibles por lo que las reacciones reversibles pueden ser tratadas como dos irreversibles para efectos de esta representación orientada a la estequiometría.

En términos de la descripción orientada a la estequiometría de la red de reacción (2.3), los modelos distribuidos del gasificador de lecho móvil (esquematisado en la figura 2.1) desarrollados en estudios recientes (Di Blasi, 2000, 2004; Shwe, 2004) pueden ser deducidos a partir del modelo generalizado de dispersión (2.2). En consecuencia, el punto de partida del presente estudio es el modelo distribuido con dispersión formado por balances de masa y energía representados por el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) sobre los dominios espacial axial ($0 \leq Z \leq L$) y temporal ($t' > 0$):

$$\partial_{t'} C_i^s = \Gamma_M^s \{C_i^s\} + \mathcal{G}_i^s(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad i = 1, \dots, n_s \quad (2.4a)$$

$$C_s C_p^s \partial_{t'} T_s = \Gamma_H^s \{T_s\} + Q_R^s(\mathbf{C}, \mathbf{T}) - Q_{sw}(\mathbf{T}) - Q_{sg}(\mathbf{T}) \quad (2.4b)$$

$$\partial_{t'} C_i^g = \Gamma_M^g \{C_i^g\} + \mathcal{G}_i^g(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad i = 1, \dots, n_g \quad (2.4c)$$

$$C_g C_p^g \partial_{t'} T_g = \Gamma_H^g \{T_g\} + Q_R^g(\mathbf{C}, \mathbf{T}) - Q_{gw}(\mathbf{T}) + Q_{sg}(\mathbf{T}) \quad (2.4d)$$

Condiciones a la frontera

$$Z = 0: \quad B_M^s \{C_s\} = 0, \quad B_M^g \{C_g\} = 0, \quad B_H^s \{T_s\} = 0, \quad B_H^g \{T_g\} = 0 \quad (2.4e)$$

$$Z = L: \quad \partial_Z C_s = 0, \quad \partial_Z C_g = 0, \quad \partial_Z T_s = 0, \quad \partial_Z T_g = 0 \quad (2.4f)$$

Condiciones iniciales

$$t' = 0 : \quad \mathbf{C}_s(Z, 0) = \mathbf{C}_{sic} \quad T_s(Z, 0) = T_{sic}, \quad (2.4g)$$

$$\mathbf{C}_g(Z, 0) = \mathbf{C}_{gic} \quad T_g(Z, 0) = T_{gic} \quad (2.4h)$$

donde

$$\mathcal{G}_i^\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \sum_{j=1}^m s_{i,j}^\pi \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad i = 1, \dots, n_\pi^R \quad (2.5a)$$

$$Q_R^\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = - \sum_{j=1}^{NR\pi} \Delta H_j \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad \pi = g, s \quad (2.5b)$$

$$Q_{sg}(\mathbf{T}) = \mathcal{A}_{sg} h_{sg}(\mathbf{T}) [T_s - T_g], \quad \mathcal{A}_{sg} = \frac{6(1 - \alpha_g)}{d_p} \quad (2.5c)$$

$$Q_{\pi w}(\mathbf{T}) = \mathcal{A}_v h_{\pi w}(\mathbf{T}) [T_\pi - T_w], \quad \mathcal{A}_v = \frac{4}{D_R} \quad (2.5d)$$

\mathcal{G}_i^π es la i -ésima velocidad de generación (producción o consumo) de moles por unidad de volumen del componente en la fase π , Q_R^π es la velocidad de generación de calor por unidad de volumen en la fase π debido a las reacciones, Q_{sg} es el término de transferencia de calor entre la fases, y $Q_{\pi g}$ es la velocidad de intercambio de calor entre las paredes del reactor y la fase π .

Γ_M^π (o Γ_H^π) (definido en la tabla 2.1) es el operador de transporte convectivo-dispersivo de masa (o de calor) para la fase π , u_g (o u_s) es la velocidad convectiva del gas (o sólido), \mathcal{D}_M es el coeficiente de dispersion de masa de la fase gas, λ_π^{eff} es la conductividad térmica efectiva de la fase π , \mathcal{D}_H^π es el coeficiente de transporte dispersivo de calor de la fase π relacionado con la conductividad efectiva mediante la ecuación (2.6), C_π es la concentración molar total de la fase π , y C_p^π es el calor específico de la fase π (ver la tabla 2.4 para consultar la nomenclatura y unidades de las variables utilizadas). Los operadores de frontera para los balances de masa B_M^π y de calor B_H^π en la fase π se encuentran definidos también en la tabla 2.1.

$$\mathcal{D}_H^\pi = \frac{\lambda_\pi^{eff}}{C_\pi C_p^\pi} \quad (2.6)$$

Cabe señalar que las ecuaciones de temperatura provienen de una ecuación de balance de entalpía de cada fase, en el que se han sustituido las ecuaciones de balance de masa de las especies químicas (Badillo-Hernández, 2009).

Resulta fundamental resaltar que el movimiento axial descendente de las partículas del sólido en el lecho del reactor es producido por el efecto combinado de la gravedad y la reducción del tamaño de partícula debido a las reacciones de gasificación heterogéneas (tiempo característico lento). La escala de tiempo de la hidrodinámica es rápida en relación con la

Tabla 2.1: Operadores del modelo del reactor de lecho móvil (2.4).

Operadores de frontera
$B_M^g\{\mathbf{x}\} := \mathcal{D}_M \partial_Z \mathbf{x} - u_g [\mathbf{x} - \mathbf{x}_e]$
$B_M^s\{\mathbf{x}\} := \mathbf{x} - \mathbf{x}_e$
$B_H^\pi\{T_\pi\} := \mathcal{D}_H^\pi \partial_Z T_\pi - u_\pi [T_\pi - T_{\pi e}]$
Operadores de transporte
$\Gamma_M^g\{\mathbf{x}\}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) := \partial_Z \left(-u_g(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \mathbf{x} + \mathcal{D}_M \partial_z \mathbf{x} \right)$
$\Gamma_M^s\{\mathbf{x}\}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) := \partial_Z \left(-u_s(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \mathbf{x} \right)$
$\Gamma_H^\pi\{T_\pi\}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) := \partial_Z \left(-u_\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) C_\pi C_p^\pi (T_\pi - T_0) + \lambda_\pi^{eff} \partial_Z T_\pi \right) + \partial_Z [C_\pi C_p^\pi u_\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T})] (T_\pi - T_0)$

escala de tiempo de los procesos de intercambio de masa y energía del reactor, por lo que la mayoría de los modelos previos (Amundson y Arri, 1978; Di Blasi, 2000; Gobel *et al.*, 2007) de gasificadores de lecho móvil no incorporan ecuaciones de momento.

El comportamiento dominante de la velocidad del sólido se supone gobernado por una ecuación de balance de masa que modela los cambios de volumen de las partículas por el consumo total del combustible sólido (Badillo-Hernández y Alvarez-Icaza, 2010):

$$\partial_{t'} C_s + \partial_Z C_s u_s(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \alpha_s \sum_{j=1}^{NRs} \sum_{i=1}^{n_s} s_{i,j}^s \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (2.7)$$

De forma análoga, el comportamiento esencial de la velocidad del flujo axial descendente del gas está determinado por la ecuación de continuidad molar del gas:

$$\partial_{t'} C_g + \partial_Z C_g u_g(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \alpha_g \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n_g} s_{i,j}^g \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (2.8)$$

Con las condiciones de frontera correspondientes:

$$Z = 0 : \quad C_g(0, t') u_g(0, t') = C_{ge} u_{ge}, \quad C_s(0, t') u_s(0, t') = C_{se} u_{se} \quad (2.9)$$

donde T_{se} , \mathbf{C}_{se} , T_{ge} , \mathbf{C}_{ge} (tabla 2.1) son las temperaturas y concentraciones de la fase sólida y gaseosa de los flujos reactantes alimentados al reactor respectivamente, mientras que u_{se} (o u_{ge}) es la velocidad de flujo de alimentación del reactante sólido (o gaseoso).

Tabla 2.2: Cinéticas intrínsecas de reacción del caso de estudio.

Pirólisis
$C_aH_bO_d \xrightarrow{k_1} 0.54C + 0.12CO + 0.083CO_2 + 0.098H_2 + 0.273CH_4 + 0.064H_2O \quad (\mathcal{R}_1)$
Combustión de carbonizado
$C + O_2 \xrightarrow{k_2} CO_2 \quad (\mathcal{R}_2)$
Reducción de carbonizado
$C + CO_2 \xrightarrow{k_3} 2CO \quad (\mathcal{R}_3)$
$C + H_2O \xrightarrow{k_4} CO + H_2 \quad (\mathcal{R}_4)$
Water gas shift
$CO + H_2O \xrightarrow{k_5} CO_2 + H_2 \quad (\mathcal{R}_5)$
$CO_2 + H_2 \xrightarrow{k_6} CO + H_2O \quad (\mathcal{R}_6)$
Oxidación de gases
$2CO + O_2 \xrightarrow{k_7} 2CO_2 \quad (\mathcal{R}_7)$
$2H_2 + O_2 \xrightarrow{k_8} 2H_2O \quad (\mathcal{R}_8)$

2.6. Problema de modelado.

Estudios recientes acerca de gasificadores de lecho móvil (Di Blasi, 2000, 2004; Rogel y Aguillon, 2006; Gobel *et al.*, 2007) han analizado el comportamiento en estado estacionario y algunos aspectos de la dinámica mediante aproximaciones numéricas del modelo distribuido (2.4) utilizando diferencias finitas, volumen finito y software especializado de dinámica de fluidos computacional (DFC) con mallas espaciales suficientemente densas. Los modelos subyacentes están compuestos de 100 a 500 volúmenes de control (nodos internos de la malla espacial) dando lugar a sistemas de 1800 a 7000 EDOs. A pesar de que estos modelos han proporcionado resultados significativos en relación al desempeño del reactor de lecho empacado, estudios tratables subsecuentes sobre diseño de estrategias de control, monitoreo y diseño de equipo requieren del desarrollo de modelos de orden reducido y baja sensibilidad a errores de modelado en los parámetros.

Específicamente, el presente estudio se enfoca en el diseño de modelos dinámicos con el menor número posible y el acoplamiento mínimo (interacción mínima necesaria) de EDOs a la luz de la incertidumbre exhibida por los modelos de alto orden capaces de capturar y describir aspectos cualitativos del comportamiento no lineal como la estabilidad, multiplicidad y bifurcaciones de estados estacionarios, así como, la estática y la dinámica cuantitativamente con un grado de precisión requerido por el objetivo de modelado específico: síntesis de observadores y controladores, diseño de condiciones de operación y de equipo del proceso de gasificación en reactores de lecho empacado móvil.

2.7. Caso de estudio.

Con el objetivo de ilustrar, probar y comparar el esquema de modelado propuesto, se selecciona un caso ejemplo estudiado previamente mediante experimentos y simulaciones (Di Blasi, 2000): un gasificador de biomasa de flujos paralelos descendentes a escala piloto ($D_R = 0.45m$ y $L = 0.5m$). La conversión de biomasa a gas de síntesis es descrita por un modelo de núcleo de partícula contrayente (Di Blasi, 2000) en términos de los números Schmidt (Sc) y de Reynolds (Re) del lecho empacado y la red de reacción tiene: (i) $n_g = 7$ componentes de la fase gas ($n_g^R = 6$ componentes reactivos y $n_g^I = 1$ inerte: N_2), (ii) $n_s = n_s^R = 2$ componentes de la fase sólida (biomasa cruda $C_aH_bO_d$ y biomasa carbonizada C), (iii) las $m = 8$ cinéticas de reacción enumeradas en la tabla 2.2, y (iv) sus correspondientes funciones de velocidades de reacción (\mathcal{R}_j) listadas en la tabla 2.3.

La red de reacciones químicas utilizada en el caso ejemplo del gasificador de biomasa (tablas 2.2 y 2.3) tiene de 2 a 4 reacciones menos comparada con estudios previos (Rogel y Aguillon, 2006; Di Blasi, 2000), de acuerdo a las siguientes consideraciones básicas fisicoquímicas:

1. La evaporación de la humedad del combustible sólido alimentado es instantánea debido a la alta temperatura dentro del reactor por lo que la fracción de vapor de agua proveniente de ella se incorpora a la fase gaseosa mediante la condición de frontera de entrada de la componente X_{H_2O} .
2. La reacción de pirólisis secundaria de los alquitranes sucede instantáneamente, por lo tanto es posible omitir su cinética en las ecuaciones de balance.
3. Las reacciones de combustión de metano y alquitranes secundarios no tienen un aporte esencial o determinante en la cinética del proceso de gasificación para los propósitos de modelado perseguidos.
4. La reacción de hidrogasificación (reducción de carbonizado con H_2) es demasiado lenta en esta clase de reactores de gasificación por lo que se desprecia su efecto en los balances del modelo global.

Tabla 2.3: Funciones de tasas de reacción.

$\mathcal{R}_j = \kappa_j(T)f_j(\mathbf{C})$		
\mathcal{R}_j	$\kappa_j(T)$	$f_j(\mathbf{C})$
\mathcal{R}_1	k_1	C_1^s
\mathcal{R}_2	$\nu_p \left(\frac{k_2 k_m}{k_2 + k_m} \right)$	C_1^g
\mathcal{R}_3	$\nu_p \left(\frac{k_3 k_m}{k_3 + k_m} \right)$	C_4^g
\mathcal{R}_4	$\nu_p \left(\frac{k_4 k_m}{k_4 + k_m} \right)$	C_5^g
\mathcal{R}_5	k_5	$C_3^g C_5^g$
\mathcal{R}_6	k_6	$C_2^g C_4^g$
\mathcal{R}_7	k_7	$C_1^g C_3^g (C_5^g)^{1/2}$
\mathcal{R}_8	k_8	$C_1^g C_2^g$

$k_j = L_j e^{-\frac{E_j}{uT}}$
L_j, E_j : (Di Blasi, 2000)
$k_m = \frac{2.06 u_g}{\alpha_g} Re^{-0.575} Sc^{-(2/3)}$
$Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g \mathcal{D}_M}, \quad Re = \frac{d_p \rho_g u_g}{\mu_g}$
$d_p = [(1 - \chi_{ash})X_C + \chi_{ash}]^{1/3} d_{p0}$
$X_C = \frac{u_s}{u_{s0}}, \quad \nu_p = \frac{6(1-\alpha_g)}{d_p}$

La concentración molar total del gas (C_g) y la densidad del gas (ρ_g) son determinadas mediante la ley del gas ideal de acuerdo a la siguiente expresión:

$$C_g = \frac{P_g}{\mathcal{U}T}, \quad \rho_g = C_g W_g \quad (2.10)$$

donde P_g , W_g son la presión y el peso molecular promedio de la fase gas.

Debido a que la escala de tiempo característica hidrodinámica es rápida en relación a las escalas de tiempo de masa y energía, el comportamiento dominante de la velocidad del flujo axial descendente del gas es dictado principalmente por su expansión debida al aumento de temperatura de acuerdo a la ley del gas ideal (2.10) y a la transferencia de masa del sólido al gas mediante las reacciones heterogéneas de acuerdo a la ecuación de continuidad molar del gas:

$$\partial_t C_g + \partial_Z C_g u_g(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \alpha_g \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n_g} s_{i,j}^g \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (2.11)$$

De forma análoga, se utiliza la ecuación de continuidad del carbonizado para obtener la velocidad de flujo del sólido:

$$C_C \partial_Z u_s(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = -(\mathcal{R}_2(\mathbf{C}, \mathbf{T}) + \mathcal{R}_3(\mathbf{C}, \mathbf{T}) + \mathcal{R}_4(\mathbf{C}, \mathbf{T})) \quad (2.12)$$

donde C_C es la concentración de carbonizado en el lecho empacado.

La expresión (2.12) establece que la densidad del sólido es afectada únicamente por las reacciones de pirólisis, mientras que las reacciones de combustión y gasificación de carbonizado producen cambios estructurales modelados como variaciones de velocidad en ella (Di Blasi, 2000).

Los parámetros de las cinética química y de transporte ($\mu_g, \lambda_g^{eff}, \lambda_s^{eff}$) son tomadas de (Di Blasi, 2000) y (Badillo-Hernández, 2009):

$$\mu_g = 1.98 \times 10^{-5} \left(\frac{T_g}{300} \right)^{2/3} \quad (2.13)$$

$$\lambda_g^{eff} = \lambda_g = 4.8 \times 10^{-4} T_g^{0.717} \quad (2.14)$$

$$\lambda_s^{eff} = d_p \lambda_{rg} + \frac{\lambda_s}{\lambda_s / (d_p \lambda_{rs}) + 1.43(1 - 1.2\alpha_g)} \quad (2.15)$$

$$\lambda_{rg} = 4\sigma\epsilon_g T_g^3; \quad \epsilon_g = 0.05 \quad (2.16)$$

$$\lambda_{rs} = 4\sigma\epsilon_s T_s^3; \quad \epsilon_s = 0.85 \quad (2.17)$$

$$\lambda_s = 0.0013 + 0.05 \left(\frac{T_s}{1000} \right) + 0.63 \left(\frac{T_s}{1000} \right)^2 \quad (2.18)$$

Una vez presentados los antecedentes, el problema de estudio y el caso ejemplo en el cual se ilustrará la estrategia de modelado propuesta se explicarán en los 3 capítulos siguientes los conceptos y herramientas de simplificación y reducción de modelos que se aplicarán al modelo distribuido del reactor de gasificación, así como sus alcances y limitaciones en relación con el objetivo de modelado.

Tabla 2.4: Nomenclatura

C_i^π	Concentración del componente i -ésimo de la fase π en $kmol/m^3$
T_π	Temperatura de la fase π en K
\mathcal{R}_j	Velocidad de la j -ésima reacción en $kmol/(m^3s)$
ΔH_j	Cambio de entalpía de la j -ésima reacción en $kJ/kmol$
u_π	Velocidad axial de flujo de la fase π en m/s
u_H	Velocidad de flujo de calor total de ambas fases en m/s
\mathcal{D}_M	Coefficiente de dispersión de masa del gas en m^2/s
\mathcal{D}_H^π	Coefficiente de dispersión de calor de la fase π en m^2/s
C_π	Concentración molar total de la fase π en $kmol/m^3$
C_p^π	Calor específico de la fase π en $kJ/(kmol K)$
λ_π^{eff}	Conductividad efectiva de la fase π en $kW/(m K)$
h_w	Coefficiente de transferencia de calor de las paredes del reactor con el lecho en $kW/(m^2 K)$
\mathcal{A}_v	Área de transferencia de calor de la pared del reactor por unidad de volumen en m^{-1}
\mathcal{A}_{sg}	Área de transferencia de la partícula sólida con el gas por unidad de volumen en m^{-1}
A_R	Área transversal interna del reactor en m^2
D_R	Diámetro interno del reactor en m
L	Altura del reactor en m
P_g	Presión del gas en kPa
μ_g	Viscosidad de la fase gas en $kg/(m s)$
W_i^π	Masa molar del i -ésimo componente de la fase π en $kg/kmol$
L_j	Factor de Arrhenius de la j -ésima reacción
E_j	Energía de activación de la j -ésima reacción en $kJ/(kmol)$
\mathcal{U}	Constante universal de los gases en $kJ/(kmol K)$
η_p	Densidad de número de partículas en m^{-3}
d_p	Diámetro de partícula en m^{-1}
U_p	Área de partícula en m^2
X	Fracción molar de carbonizado
χ_{ash}	Fracción molar de cenizas en la partícula del carbonizado
d_{p0}	Diámetro de partícula inicial en m^{-1}
k_m	Coefficiente de transferencia de masa entre fases en m/s
k_m^*	Máximo transporte de masa entre fases en m/s

Capítulo 3

Estequiometría de la red de reacción.

Nociones básicas de la teoría de redes de reacción relacionadas con la estequiometría (Aris, 1965), (Feinberg, 1977) son explotadas y extendidas al reactor tubular de gasificación de lecho móvil en este capítulo con dos propósitos:

1. Sistematizar el método de búsqueda y construcción de un conjunto máximo de reacciones independientes a partir de una red de reacciones dada de un proceso de gasificación.
2. Obtener un modelo con la mínima dependencia de las velocidades de reacción no lineales que facilite un análisis subsecuente de estabilidad, así como, diseño de controladores y observadores.

Los dos sujetos del análisis estequiométrico que permitirá la consecución de dichos objetivos son: (i) la red de reacciones expresada en su forma orientada a la estequiometría, y (ii) los balances molares de las especies químicas (2.4a y 2.4c) del modelo distribuido del gasificador de lecho móvil (2.4). Éstos últimos son expresados en una forma matricial-vectorial compacta con el fin de facilitar la visualización y análisis de las dependencias o relaciones entre las reacciones y los componentes químicos en redes de reacción de complejidad arbitraria. Sea el conjunto de balances de masa de las especies químicas del gasificador dado por:

$$\partial_{t'} \mathbf{C}_s = \Gamma_M^s \{ \mathbf{C}_s \} (\mathbf{C}, \mathbf{T}) + \mathbf{S}_s^T \mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (3.1a)$$

$$\partial_{t'} \mathbf{C}_g = \Gamma_M^g \{ \mathbf{C}_g \} (\mathbf{C}, \mathbf{T}) + \mathbf{S}_g^T \mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (3.1b)$$

$$\mathbf{S}_s = [s_{i,j}^s], \dim(\mathbf{S}_s) = (m, n_s^R) \quad (3.1c)$$

$$\mathbf{S}_g = [s_{i,j}^g], \dim(\mathbf{S}_g) = (m, n_g^R) \quad (3.1d)$$

donde

$$\mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = [\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2, \dots, \mathcal{R}_m]^T,$$

\mathbf{S}_s^T (or \mathbf{S}_g^T) denota la transpuesta de la matriz estequiométrica de la fase sólida (o gaseosa).

En una forma más compacta la ecuación (3.1) se puede escribir como sigue:

$$\partial_{\nu} \mathbf{C} = \Gamma_M \{\mathbf{C}\} + \mathbf{S}^T \mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad \Gamma_M \{\mathbf{C}\} = \begin{bmatrix} \Gamma_M^s \{\mathbf{C}_s\} \\ \Gamma_M^g \{\mathbf{C}_g\} \end{bmatrix} \quad (3.2a)$$

$$\mathbf{S}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_s^T \\ \mathbf{S}_g^T \end{bmatrix}, \quad \text{rank}(\mathbf{S}) = N_r \leq m, \quad n_g^R + n_s^R - N_r = \nu_r \quad (3.2b)$$

donde \mathbf{S} es la matriz estequiométrica aumentada total del sistema reactivo de dos fases

La matriz estequiométrica \mathbf{S} provee la siguiente información en el contexto de sistemas de reacción:

1. Las relaciones de dependencia entre las reacciones, específicamente lineales para el caso de coeficientes estequiométricos constantes.
2. Los efectos combinados de las reacciones sobre la dinámica de las concentraciones molares del reactor.

El objetivo metodológico del análisis de la estequiometría realizado en este capítulo consiste en mostrar dicha información de forma clara para sistemas de reacción de complejidad arbitraria.

De acuerdo a la teoría de redes de reacción (Aris, 1965; Feinberg, 1977), la evaluación del rango de la matriz estequiométrica \mathbf{S} (3.2b) acompañada de un procedimiento algebraico lleva a una representación simplificada del modelo en el sentido de que: (i) sólo un conjunto de N_r reacciones independientes deben ser consideradas, y (ii) existen $n_s^R + n_g^R$ combinaciones de balances de masa de los componentes sólidos (3.1a) y gaseosos (3.1b) para obtener una partición de N_r balances de pseudo-especies (combinaciones lineales de concentraciones de especies originales) reactivas y ν_r balances de pseudo-especies no reactivas tal que $N_r + \nu_r = n_s^R + n_g^R$, la cual denominaremos representación reactiva-no reactiva de los balances de masa del reactor.

Cabe señalar que dichas consideraciones y conceptos de la teoría de redes de reacción son generales e independientes del modo de operación (batch, semi-batch o flujo continuo) y geometría (RCTA, tubular) del reactor. Sin embargo, la aplicación directa de la representación reactiva-no reactiva a los balances de masa del gasificador de lecho móvil (3.1a)-(3.1b) combinaría dinámicas de las componentes sólidas y gaseosas en los balances de las pseudo-especies, impidiendo la reducción de orden del sistema distribuido (2.4) mediante la hipótesis de estado cuasi-estacionario del gas que se desarrollará en el próximo capítulo. Por lo tanto, la representación simplificada del modelo se lleva a cabo en cada fase por separado en el presente esquema de modelado.

3.1. Conjunto de reacciones independientes.

La evaluación del rango N_r de la matriz estequiométrica \mathbf{S} permite determinar el grado de dependencia entre las reacciones consideradas. Si la matriz \mathbf{S} es de rango completo ($N_r = m$)

entonces todas las reacciones de la red son independientes y necesarias para describir su efecto en la evolución espacial y temporal de las concentraciones de los componentes del sistema. Por el contrario, si $N_r < m$ entonces:

1. Existen N_r reacciones linealmente independientes, en el sentido de que sólo N_r reacciones son necesarias para describir la red de reacción y $m - N_r$ reacciones proveen información redundante desde el punto de vista de la estequiometría.
2. Es posible construir un conjunto de N_r reacciones independientes mediante combinaciones lineales de las reacciones originales e investigar su efecto sobre un conjunto específico de combinaciones de concentraciones.

Una forma sistemática estándar de construir un conjunto de N_r reacciones independientes consiste en aplicar un procedimiento de eliminación de Gauss-Jordan a la matriz estequiométrica (Aris, 1965; Feinberg, 1977) para obtener la forma escalonada reducida por filas de la matriz \mathbf{S} .

De forma análoga, el presente estudio aprovecha la factorización de rango basada en la matriz escalonada reducida por filas de \mathbf{S} (3.3a) para obtener una nueva matriz estequiométrica troncada \mathcal{S} y el correspondiente vector de velocidades de reacción \mathcal{N} en términos del conjunto de reacciones independientes.

$$\mathbf{S}^T = \mathcal{S}^T \mathcal{M} \quad (3.3a)$$

$$\dim(\mathcal{S}) = (N_r, n_s^R + n_g^R), \dim(\mathcal{M}) = (N_r, m)$$

$$\mathcal{S}^T = \begin{bmatrix} \mathcal{S}_s^T \\ \mathcal{S}_g^T \end{bmatrix}, \dim(\mathcal{S}_\pi) = (N_r, n_\pi^R),$$

$$\text{rank}(\mathcal{S}_\pi) = N_\pi = \min(N_r, n_\pi^R) \quad \pi = s, g \quad (3.3b)$$

donde \mathcal{S} está formada por las N_r columnas pivote de \mathbf{S} y \mathcal{M} es construida con las N_r filas no cero de la forma escalonada reducida por filas de \mathbf{S} . Por lo tanto, el vector de velocidades de generación

$$\mathcal{G}_\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \mathcal{S}_\pi^T \mathcal{N}(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \mathcal{N}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) := \mathcal{M}\mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (3.4)$$

puede ser escrito en términos del nuevo vector \mathcal{N} con las velocidades de reacción independientes estequiométricamente.

En consecuencia, las nuevas matrices estequiométricas ($\mathcal{S}_s, \mathcal{S}_g$) de rango completo (3.3b) son el punto de partida de la siguiente representación reactiva-no reactiva de los balances de masa del reactor, la cual permitirá visualizar en forma clara el efecto de las reacciones independientes sobre un conjunto específico de pseudo-especies (combinaciones lineales de concentraciones originales).

3.2. Representación reactiva-no reactiva de balances molares por fase.

En esta sección se deduce una representación simplificada de los balances molares de las especies químicas aplicando el análisis estequiométrico de la teoría de redes de reacción (Aris, 1965; Feinberg, 1977) en cada fase termodinámica por separado a fin de mantener las dinámicas del gas y del sólido independientes y poder reducir el orden del sistema distribuido mediante la hipótesis de estado cuasiestacionario del gas realizada en el siguiente capítulo.

Si el número de componentes de la fase π excede el número de reacciones que involucran a componentes de la misma fase ($n_\pi^R > N_\pi$), entonces existe un conjunto de $n_\pi^R - N_\pi$ combinaciones lineales de las n_π^R concentraciones de las componentes de la fase π , o de forma equivalente, un cambio de coordenadas de las concentraciones:

$$\mathbf{c}_s := \begin{bmatrix} \mathbf{W}_s \\ \mathbf{E}_s \end{bmatrix} = \mathbf{P}_s \mathbf{C}_s, \quad \mathbf{c}_g := \begin{bmatrix} \mathbf{W}_g \\ \mathbf{E}_g \end{bmatrix} = \mathbf{P}_g \mathbf{C}_g \quad (3.5)$$

tal que los balances molares (3.1) son transformados en la forma reactiva-no reactiva:

$$\partial_{t'} \mathbf{W}_s = \Gamma_M^s \{ \mathbf{W}_s \} (\mathbf{c}, \mathbf{T}) + \mathbf{R}_s (\mathbf{c}, \mathbf{T}) \quad (3.6a)$$

$$\partial_{t'} \mathbf{E}_s = \Gamma_M^s \{ \mathbf{E}_s \} (\mathbf{c}, \mathbf{T}) \quad (3.6b)$$

$$\partial_{t'} \mathbf{W}_g = \Gamma_M^g \{ \mathbf{W}_g \} (\mathbf{c}, \mathbf{T}) + \mathbf{R}_g (\mathbf{c}, \mathbf{T}) \quad (3.6c)$$

$$\partial_{t'} \mathbf{E}_g = \Gamma_M^g \{ \mathbf{E}_g \} (\mathbf{c}, \mathbf{T}) \quad (3.6d)$$

$$\mathbf{R}_s (\mathbf{c}, \mathbf{T}) = \mathcal{P}_s^R \mathcal{S}_s^T \mathcal{N} (\mathbf{C}_s, \mathbf{C}_g, \mathbf{T}) \quad (3.6e)$$

$$\mathbf{R}_g (\mathbf{c}, \mathbf{T}) = \mathcal{P}_g^R \mathcal{S}_g^T \mathcal{N} (\mathbf{C}_s, \mathbf{C}_g, \mathbf{T}) \quad (3.6f)$$

$$\mathbf{c} = [\mathbf{W}_s^T, \mathbf{E}_s^T, \mathbf{W}_g^T, \mathbf{E}_g^T]^T$$

$$\mathbf{C}_s = \mathbf{P}_s^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{W}_s \\ \mathbf{E}_s \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_g = \mathbf{P}_g^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{W}_g \\ \mathbf{E}_g \end{bmatrix} \quad (3.6g)$$

donde

$$\mathbf{P}_\pi = \begin{bmatrix} \mathcal{T}_\pi & \mathbf{0}_{n_\pi^R \times n_\pi^I} \\ \mathbf{0}_{n_\pi^R \times n_\pi^I} & \mathbf{I}_{n_\pi^I} \end{bmatrix}, \quad \mathcal{T}_\pi = \begin{bmatrix} \mathcal{P}_\pi^R \\ \mathcal{P}_\pi^N \end{bmatrix} \quad (3.7a)$$

$$\dim(\mathcal{P}_\pi^R) = (N_\pi, n_\pi^R), \quad \dim(\mathcal{P}_\pi^N) = (n_\pi^R - N_\pi, n_\pi^R)$$

$$\mathbf{W}_\pi = [W_1^\pi, W_2^\pi, \dots, W_{N_\pi}^\pi]^T \quad (3.7b)$$

$$\mathbf{E}_\pi = [\mathcal{E}_\pi^T, \mathcal{I}_\pi^T]^T; \quad \pi = g, s \quad (3.7c)$$

$$\mathcal{E}_\pi = [\mathcal{E}_1^\pi, \mathcal{E}_2^\pi, \dots, \mathcal{E}_{n_\pi^R - N_\pi}^\pi]^T \quad (3.7d)$$

$$\mathcal{I}_\pi = [\mathcal{I}_1^\pi, \mathcal{I}_2^\pi, \dots, \mathcal{I}_{n_\pi^I}^\pi]^T \quad (3.7e)$$

\mathbf{W}_π es el vector de concentraciones reactivas de la fase π , \mathbf{E}_π el vector que contiene el vector de concentraciones no reactivas \mathcal{E}_π y el vector de concentraciones de las especies inertes \mathcal{I}_π , $\mathbf{I}_{n_\pi^I}$ es la matriz identidad de tamaño n_π^I , $\mathbf{0}_{n_\pi^R \times n_\pi^I}$ es una matriz de ceros de tamaño $n_\pi^R \times n_\pi^I$, \mathcal{P}_π^R y \mathcal{P}_π^N son las matrices de cambio de coordenadas de concentraciones correspondientes a las pseudo-componentes reactivas y no reactivas, respectivamente.

Las matrices \mathcal{P}_π^R y \mathcal{P}_π^N , que determinan la partición del espacio de concentraciones en reactivo y no reactivo (3.7a), pueden ser encontradas por inspección (Aris, 1965; Amundson y Arri, 1978) combinando las ecuaciones de balance molar (2.4a y 2.4c) de forma que la dependencia de los términos no lineales de reacción se reduzca o elimine en un número máximo de balances. Sin embargo, el método de inspección no es adecuado si la red de reacción es compleja y existe un cierto grado de incertidumbre en algunos coeficientes estequiométricos.

Una diversidad de herramientas de álgebra lineal se pueden aplicar para encontrar la matriz de transformación \mathbf{P}_π con base a la descomposición de espacios nulos y rango de \mathcal{S}_π^T . En vista de la incertidumbre de algunos coeficientes estequiométricos (los parámetros de la pirólisis o devolatilización en específico), se utiliza en este estudio un cambio de coordenadas orientado a robustez, basado en la descomposición de valores singulares (DVS). Para este propósito, la DVS de la matriz estequiométrica truncada \mathcal{S}_π^T es escrita de la siguiente forma:

$$\mathcal{S}_\pi^T = \mathbf{U}_\pi \mathbf{\Sigma}_\pi \mathbf{V}_\pi^T \quad (3.8)$$

donde \mathbf{U}_π (o \mathbf{V}_π) es una matriz unitaria de dimensiones $n_\pi^R \times n_\pi^R$ (or $N_\pi \times N_\pi$) cuyas columnas son los vectores singulares izquierdos (o derechos) de \mathcal{S}_π^T , $\mathbf{\Sigma}_\pi$ es la matriz diagonal con los valores singulares de \mathcal{S}_π^T . Así pues, las matrices \mathcal{P}_π^R y \mathcal{P}_π^N determinadas por medio del método de DVS son:

$$\mathcal{T}_\pi = \begin{bmatrix} \mathcal{P}_\pi^R \\ \mathcal{P}_\pi^N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{S}_\pi^+ \\ \mathbf{L}_\pi \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

donde \mathbf{L}_π^T es construida a partir de las últimas ν_π columnas de \mathbf{U}_π y \mathcal{S}_π^+ es obtenida de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\mathcal{S}_\pi^+ = \mathbf{V}_\pi \mathbf{\Sigma}_\pi^+ \mathbf{U}_\pi^T \quad (3.10)$$

donde $\mathbf{\Sigma}_\pi^+$ es la matriz pseudo-inversa de $\mathbf{\Sigma}_\pi$, la cual se obtiene tomando el recíproco de cada elemento de la diagonal que no es cero, dejando los ceros en su lugar y transponiendo la matriz resultante.

La representación simplificada de la dinámica de las concentraciones permite analizar el efecto individual de cada reacción independiente (una combinación específica de reacciones originales) en la evolución temporal y espacial de la concentración de cada pseudo-especie reactiva (una combinación lineal de las concentraciones originales). Por lo tanto, los elementos de la matriz de transformación \mathcal{P}_π^R determinarán sobre que componentes originales tiene un efecto predominante una cierta reacción independiente y sobre cuales su efecto es menor

Tabla 3.1: Conjunto de reacciones del caso ejemplo de gasificación de biomasa

R_j	$+s_{1,j}^s \Omega_1^s$	$+s_{2,j}^s \Omega_2^s$	$+s_{1,j}^g \Omega_1^g$	$+s_{2,j}^g \Omega_2^g$	$+s_{3,j}^g \Omega_3^g$	$+s_{4,j}^g \Omega_4^g$	$+s_{5,j}^g \Omega_5^g$	$+s_{6,j}^g \Omega_6^g = 0$
R_1	$-C_a H_b O_d$	$+0.54C$		$+0.098H_2$	$+0.119CO$	$+0.083CO_2$	$+0.273H_2O$	$+0.064CH_4$
R_2		$-C$	$-O_2$			$+CO_2$		
R_3		$-C$			$+2CO$	$-CO_2$		
R_4		$-C$		$+H_2$	$+CO$		$-H_2O$	
R_5				$+H_2$	$-CO$	$+CO_2$	$-H_2O$	
R_6				$-H_2$	$+CO$	$-CO_2$	$+H_2O$	
R_7			$-O_2$		$-2CO$	$+2CO_2$		
R_8			$-O_2$	$-2H_2$			$+2H_2O$	

e incluso despreciable.

En particular, cuando $n_\pi^R \leq N_\pi$, el cambio de coordenadas (3.5) no es necesario en la fase π y los correspondientes balances molares de (3.6) sólo tienen parte reactiva porque tenemos que:

$$\mathbf{c}_\pi = \mathbf{W}_\pi = \mathbf{C}_\pi, \quad \mathbf{P}_\pi = \mathbf{I}_{n_\pi} \quad (3.11a)$$

$$\mathbf{R}_\pi(\mathbf{c}, \mathbf{T}) = \mathcal{S}_\pi \mathcal{N}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (3.11b)$$

3.3. Estequiometría de la gasificación de biomasa.

Los conceptos de redes de reacción vinculadas con la estequiometría se aplican al caso ejemplo para ilustrar las relaciones de dependencia de las reacciones y la dinámica de las concentraciones de las especies químicas en una representación simplificada.

La matriz estequiométrica correspondiente a la red de reacciones de la gasificación de biomasa es construida con la ayuda de la tabla 3.1:

$$\mathbf{S}^T = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.54 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0.098 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & 0 & -2 \\ 0.119 & 0 & 2 & 1 & -1 & 1 & -2 & 0 \\ 0.083 & 1 & -1 & 0 & 1 & -1 & 2 & 0 \\ 0.273 & 0 & 0 & -1 & -1 & 1 & 0 & 2 \\ 0.064 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

donde \mathbf{S}_s^T está formada por las primeras $n_s^R = 2$ filas de \mathbf{S}^T y \mathbf{S}_g^T por las últimas $n_g^R = 6$ filas de \mathbf{S}^T .

Resulta importante recordar que las consideraciones estequiométricas de la red de reacción que a continuación se realizan sólo consideran las n^R componentes químicas reactivas, debido a que las especies inertes no participan en ninguna reacción.

Al evaluar el rango (3.13) y por inspección de la matriz estequiométrica del caso de estu-

dio (3.12) se encuentra que hay $N_r = 4$ reacciones independientes y componentes reactivos del total de especies (gaseosas y sólidas).

$$\dim(\mathbf{S}) = (8, 8), \quad N_r = \text{rank}(\mathbf{S}) = 4, \quad \nu_r = 4 \quad (3.13)$$

Con base en la forma escalonada reducida por filas de \mathbf{S}^T , la nueva matriz estequiométrica troncada \mathcal{S} para el caso ejemplo está formada por el conjunto de las primeras $N_r = 4$ reacciones ($R_1 - R_4$) de la matriz estequiométrica original \mathbf{S} (3.12):

$$\mathcal{S}^T = \begin{bmatrix} \mathcal{S}_s^T \\ \mathcal{S}_g^T \end{bmatrix}, \quad \dim(\mathcal{S}) = (8, 4), \quad \text{rank}(\mathcal{S}) = 4 \quad (3.14)$$

donde:

$$\mathcal{S}_s^T = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.54 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \text{rank}(\mathcal{S}_s) = 2$$

$$\mathcal{S}_g^T = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0.098 & 0 & 0 & 1 \\ 0.119 & 0 & 2 & 1 \\ 0.083 & 1 & -1 & 0 \\ 0.273 & 0 & 0 & -1 \\ 0.064 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{rank}(\mathcal{S}_g) = 4$$

De acuerdo a este resultado existen 4 reacciones redundantes en la red de reacciones de gasificación de biomasa (tabla 3.1), implicando que las últimas 4 reacciones (water gas shift y combustiones de los gases) son dependientes y pueden ser escritas como combinaciones lineales de las 4 primeras.

En el presente estudio, el conjunto de reacciones independientes es provisto por la factorización de rango de la matriz \mathbf{S}^T (3.3a) a partir de su forma escalonada reducida por filas eliminando las filas de ceros:

$$\mathcal{M} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & 0 & -2 \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

El vector \mathcal{N} con las $N_r = 4$ velocidades de reacción independientes correspondientes está dado por la ecuación (3.16), en el entendido de que tal representación es realizada para

propósitos de robustez y no para interpretación química.

$$\mathcal{N}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 \\ \mathcal{R}_2 + \mathcal{R}_7 + \mathcal{R}_8 \\ \mathcal{R}_3 - \mathcal{R}_5 + \mathcal{R}_6 - \mathcal{R}_7 + \mathcal{R}_8 \\ \mathcal{R}_4 + \mathcal{R}_5 - \mathcal{R}_6 - 2\mathcal{R}_8 \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

En consecuencia, la primera reacción independiente es la pirólisis y las últimas tres reacciones independientes son combinaciones lineales del resto de las reacciones de la tabla 2.2.

Dado que $n_g^R > N_g$, se obtiene una partición de las $\iota_g = 2$ pseudo-componentes no reactivas y las $N_g = 4$ pseudo-especies reactivas del espacio de concentraciones de la fase gaseosa por medio del cambio de coordenadas lineal de concentraciones (3.7a)-(3.7c), que para el caso de estudio tiene la siguiente forma:

$$\mathbf{P}_g = \begin{bmatrix} \mathcal{T}_g & \mathbf{0}_{6 \times 1} \\ \mathbf{0}_{1 \times 6} & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{T}_g = \begin{bmatrix} \mathcal{P}_g^R \\ \mathcal{P}_g^N \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

donde el elemento 1 de la matriz de transformación \mathbf{P}_g corresponde a la concentración del componente inerte del gas N_2 , ya que dicha transformación incorpora todas las componentes de la fase gas (reactivas e inertes).

La matriz \mathcal{P}_g^R es calculada a partir de la pseudo-inversa obtenida mediante la DVS de \mathcal{S}_g^T (3.10):

$$\mathcal{P}_g^R = \mathcal{S}_g^+ = \begin{bmatrix} 0.9 & 1.9 & 0.45 & 0.9 & 2.3 & 0.74 \\ -0.65 & -0.25 & 0.18 & 0.35 & -0.08 & -0.06 \\ -0.22 & -0.35 & 0.39 & -0.22 & 0.04 & -0.05 \\ 0.17 & 0.6 & 0.08 & 0.17 & -0.31 & 0.05 \end{bmatrix}$$

y \mathcal{P}_g^N se construye de las últimas 2 filas de la matriz \mathbf{U}_g^T proveniente de la DVS de \mathcal{S}_g^T (3.8):

$$\mathcal{P}_g^N = \mathbf{L}_g = \begin{bmatrix} -0.58 & 0.45 & -0.29 & -0.58 & 0.16 & -0.09 \\ -0.11 & -0.09 & -0.06 & -0.11 & -0.14 & 0.97 \end{bmatrix}$$

Debido a que $N_s = n_s^R$ (3.11a) para el caso ejemplo del gasificador de biomasa no es necesario un cambio de coordenadas de las especies sólidas, y por lo tanto se tiene que:

$$\mathbf{c}_s = \mathbf{W}_s = \mathbf{C}_s, \quad \mathbf{C}_s = [C_1^s, C_2^s]^T \quad (3.18a)$$

$$\mathbf{R}_s(\mathbf{c}, \mathbf{T}) = \mathcal{G}_s = \mathcal{S}_s^T \mathcal{N}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (3.18b)$$

Es importante enfatizar que el cambio de coordenadas de las concentraciones propuesto no es único. Amundson y Arri (1978) muestran una transformación de coordenadas obtenida mediante inspección para un gasificador de carbón. Se trata de una red de reacción similar a la del caso del estudio de biomasa pero sin pirólisis.

García Anaya (2014) propone un método para construir una matriz de transformación o una forma de combinar componentes que dota de sentido químico a las pseudo-componentes reactivas y no reactivas resultantes, con el objetivo de facilitar el entendimiento de la influencia de la red de reacciones en el desempeño de un gasificador de carbón.

En el presente capítulo se propuso un método sistemático para la selección de un conjunto máximo de reacciones independientes dada una red de reacciones.

Adicionalmente, se desarrolló una representación simplificada de los balances de masa de las componentes químicas para un reactor de dos fases de lecho empacado basada en la teoría de redes de reacción (Aris, 1965), (Feinberg, 1977). La simplificación consiste en un cambio de coordenadas de las concentraciones originales produciendo un modelo con la mínima dependencia de los términos de reacción no lineales, propiedad que puede ser aprovechada para análisis de estabilidad, así como para diseño de sistemas de control y observadores.

Capítulo 4

Reducción del modelo distribuido del gasificador de lecho móvil.

Los reactores de gasificación son sistemas dinámicos que manifiestan en su comportamiento la presencia de múltiples escalas de variación tanto en el tiempo como en el espacio como consecuencia de la interacción de procesos con velocidades características muy distintas entre si. Es por ello que los modelos de dichos reactores muestran una alta sensibilidad y mal condicionamiento a errores en datos de entrada y parámetros. En el presente capítulo se explota la propiedad de múltiples escalas de tiempo del modelo distribuido con dispersión del reactor de gasificación (2.4) con dos propósitos: (i) reducir su sensibilidad y rigidez numérica, y (ii) simplificar y reducir el orden dinámico (número de ecuaciones transitorias).

El objetivo de esta capítulo consiste en deducir un modelo de orden reducido en parámetros distribuidos de un reactor de gasificación con lecho empacado aplicando el método de perturbaciones singulares estándar descrito en la sección A.1 del apéndice A al modelo dinámico en parámetros distribuidos del gasificador (2.4). De acuerdo a la teoría de perturbaciones presentada en el apéndice B, el modelo simplificado obtenido debe heredar propiedades estructurales del modelo completo pero no la alta sensibilidad y rigidez numérica originada por la diferencia en las dimensiones (en el sentido de tamaño o magnitud) de los parámetros y variables en las ecuaciones de balance del modelo completo.

El esquema de simplificación de modelo se presenta en este capítulo de acuerdo a la siguiente organización: se obtiene una forma adimensional del modelo (2.4), el cual tiene la estructura del modelo estándar de perturbaciones singulares. Dicho modelo adimensional permite identificar como variables rápidas a las concentraciones y temperatura del gas y como variables lentas a la temperatura y concentraciones de la fase sólida debido a la gran diferencia entre las densidades de la partícula sólida y del gas. Después se presentan los dos subsistemas en los que se descompone el modelo estándar: (i) el modelo reducido, que representa la dinámica dominante (promedio) determinada por las concentraciones y temperatura del sólido, y (ii) el modelo de capa límite, que captura las variaciones y desviaciones del comportamiento promedio de las variables rápidas: concentraciones y temperatura del gas. Finalmente, se aplica una hipótesis simplificante adicional al modelo distribuido del

gasificador en la forma adimensional: la velocidad de intercambio de calor entre fases es infinita y por lo tanto, ambas fases tienen una misma temperatura.

4.1. Forma estándar de perturbaciones singulares.

El modelo en las variables originales puede ocultar la causa del comportamiento de dos escalas de tiempo-espacio, mostrado por algunos sistemas, en el que algunas variables son predominantemente lentas mientras que otras son rápidas en una capa límite y lentas en el resto del dominio. Dicha conducta se manifiesta como una alta sensibilidad y rigidez numérica del modelo, haciendo complicado o incluso, intratable un análisis numérico del mismo.

La base del método de reducción de modelo consiste en proponer un cambio de coordenadas de variables dependientes e independientes que lleve al sistema a la forma estándar de perturbaciones singulares, en la que se evidencia la separación de dos escalas de variación y el parámetro singular que la origina. La transformación de coordenadas más sencilla y de uso extensivo por su efectividad, es el escalamiento por constantes características de las variables. La identificación de los parámetros característicos tiene su fundamento sistemático en el análisis dimensional. Es por ello que el problema de reducción de modelo utilizando métodos de perturbaciones está intrínsecamente ligado al análisis dimensional del modelo (Aris, 1999).

La forma adimensional de un modelo provee los siguientes beneficios:

1. Se observan con claridad las contribuciones relativas de las diferentes cantidades de las ecuaciones de balance. Escribir el modelo en términos de parámetros adimensionales permite comparar el efecto de cada proceso físico-químico (transporte convectivo, dispersivo, reacciones, intercambios de calor, entre otros) en el balance, así como, el grado de interacción entre ellos. De esta manera, se distinguen los términos de importancia significativa y los términos despreciables de la ecuación de balance.
2. Reduce el error de redondeo en la simulación numérica del modelo. La manipulación de cantidades pequeñas y grandes en una aritmética con precisión finita lleva a una acumulación significativa de los errores de redondeo de las operaciones individuales. En este sentido, la normalización de un modelo trata de homogeneizar las dimensiones de las variables y parámetros para que los operandos sean del mismo orden de magnitud.

El primer paso del esquema de reducción de orden es normalizar las variables y los parámetros del modelo distribuido del gasificador de lecho empacado (2.4) y expresarlo en términos de las variables adimensionales siguientes de forma análoga al estudio reciente (Baldea y Daoutidis,

2007):

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_s &= \frac{\mathbf{C}_s}{C_{s0}}, & \mathbf{c}_g &= \frac{\mathbf{C}_g}{C_{g0}}, & \eta_s &= \frac{T_s}{T_{s0}}, & \eta_g &= \frac{T_g}{T_{g0}}, & z &= \frac{Z}{L}, & t &= \frac{u_{s0} t'}{L}, \\
\mathbf{v}_g &= \frac{u_g}{u_{g0}}, & \mathbf{v}_s &= \frac{u_s}{u_{s0}}, & D_M &= \frac{\mathcal{D}_M}{\mathcal{D}_{M0}}, & D_H^s &= \frac{\mathcal{D}_H^s}{\mathcal{D}_{H0}^s}, & D_H^g &= \frac{\mathcal{D}_H^g}{\mathcal{D}_{H0}^g}, \\
h_{sw} &= \frac{h_{sw}}{h_{sw0}}, & h_{gw} &= \frac{h_{gw}}{h_{gw0}}, & h_{sg} &= \frac{h_{sg}}{h_{sg0}}, & c_p^s &= \frac{C_p^s}{C_{p0}}, & c_p^g &= \frac{C_p^g}{C_{p0}}, \\
c_s &= \frac{C_s}{C_{s0}}, & c_g &= \frac{C_g}{C_{g0}}, & \eta_w &= \frac{T_w}{T_{n0}}
\end{aligned} \tag{4.1a}$$

donde los denominadores en (4.1a) son las constantes características de referencia seleccionados de acuerdo a las condiciones de operación específicas bajo estudio y \mathcal{D}_{H0}^π es el coeficiente nominal de dispersión de calor de la fase π expresado en términos de constantes características previamente definidas:

$$\mathcal{D}_{H0}^s = \frac{\lambda_{s0}}{C_{s0}C_{p0}}, \quad \mathcal{D}_{H0}^g = \frac{\lambda_{g0}}{C_{g0}C_{p0}} \tag{4.1b}$$

Los grupos dimensionales que surgen del escalamiento anterior de las variables del modelo son definidos en la ecuación (4.1c)

$$\begin{aligned}
Da_j &= \frac{LR_j(\mathbf{C}_{g0}, T_{n0})}{u_{g0}C_{g0}}, & Br_j &= \frac{\Delta H_j^r}{C_{p0}T_{g0}}, & K_M &= \frac{C_{g0}u_{g0}}{C_{s0}u_{s0}}, & \varepsilon &= \frac{u_{s0}}{u_{g0}}, \\
St_{gw} &= \frac{Lh_{gw0}\mathcal{A}_v}{C_{g0}C_{p0}u_{g0}}, & St_{sw} &= \frac{Lh_{sw0}\mathcal{A}_v}{C_{g0}C_{p0}u_{g0}}, & St_{sg} &= \frac{Lh_{sg0}\mathcal{A}_{sg}}{C_{g0}C_{p0}u_{g0}}, \\
Pe_M &= \frac{Lu_{g0}}{\mathcal{D}_{M0}}, & Pe_H^s &= \frac{Lu_{s0}}{\mathcal{D}_{H0}^s}, & Pe_H^g &= \frac{Lu_{g0}}{\mathcal{D}_{H0}^g}
\end{aligned} \tag{4.1c}$$

donde Pe_M es el número de Peclet de masa para la fase gas, Pe_H^s (o Pe_H^g) es el número de Peclet de calor de la fase sólida (o de la fase gaseosa), St_{sw} (o St_{gw}) es el número de Stanton de intercambio de calor entre la pared del reactor y el sólido (o entre la pared y el gas), St_{sg} es el número de Stanton de intercambio de calor entre las fases, Da_j y B_j son el número de Damkholer y el incremento adiabático de temperatura para la reacción j -ésima, respectivamente.

El parámetro de perturbación singular ε es un número adimensional que define el cociente del tiempo característico de convección del gas y el tiempo de residencia característico del sólido, mientras que K_M es la relación característica entre el flux convectivo de gas (aire) y el flux convectivo del combustible sólido alimentado.

La forma adimensional del modelo del gasificador está dada por el siguiente sistema de EDPs en términos de los operadores de transporte de la ecuación (4.5):

$$\partial_t \mathbf{c}_s = \tau_s^C \{\mathbf{c}_s\}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \mathbf{r}_s(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \quad (4.2a)$$

$$\partial_t \eta_s = \tau_{Hs}^C \{\eta_s\}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{Pe_H^s} \tau_{Hs}^D \{\eta_s\}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \mathcal{Q}_{Ts}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \quad (4.2b)$$

$$\varepsilon \partial_t \mathbf{c}_g = \tau_g^C \{\mathbf{c}_g\}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{Pe_M} \tau_g^D \{\mathbf{c}_g\}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \mathbf{r}_g(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \quad (4.2c)$$

$$\varepsilon \partial_t \eta_g = \tau_{Hg}^C \{\eta_g\}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{Pe_H^g} \tau_{Hg}^D \{\eta_g\}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \mathcal{Q}_{Tg}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \quad (4.2d)$$

$$\mathbf{c} = [\mathbf{c}_s^T, \mathbf{c}_g^T]^T, \quad \mathbf{C}_\pi = \mathbf{c}_\pi C_{\pi 0}, \quad T_\pi = \eta_\pi T_{\pi 0}, \quad \pi = g, s \quad (4.2e)$$

con condiciones iniciales y de frontera adimensionales:

$$z = 0 : \quad \beta_g \{\mathbf{c}_g\} = 0, \quad \beta_s \{\mathbf{c}_s\} = 0, \quad \beta_{Hg} \{\eta_g\} = 0, \quad \beta_{Hs} \{\eta_s\} = 0 \quad (4.2f)$$

$$z = 1 : \quad \partial_z \mathbf{c}_g = 0, \quad \partial_z \mathbf{c}_s = 0, \quad \partial_z \eta_g = 0, \quad \partial_z \eta_s = 0 \quad (4.2g)$$

$$t = 0 : \quad \mathbf{c}_s(z, 0) = \frac{\mathbf{C}_{sic}}{C_{s0}}, \quad \eta_s(z, 0) = \frac{T_{sic}}{T_{s0}}, \quad \mathbf{c}_g(z, 0) = \frac{\mathbf{C}_{gic}}{C_{g0}}, \quad \eta_g(z, 0) = \frac{T_{gic}}{T_{g0}} \quad (4.2h)$$

donde los operadores de frontera adimensionales son definidos en la ecuación (4.4) y los términos fuente están dados por las expresiones:

$$\mathbf{r}_s(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) = K_M \mathbf{S}_s^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \quad (4.3a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{Ts}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) = & \frac{K_M}{c_s c_p^s} [-St_{sg} h_{sg}(\boldsymbol{\eta})(\eta_s - \eta_g) - St_{sw} h_{sw}(\boldsymbol{\eta})(\eta_s - \eta_w)] - \\ & \frac{K_M}{c_s c_p^s} \left[\alpha_s \sum_{j=1}^{NRs} B_j D a_j r_j(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \right] \end{aligned} \quad (4.3b)$$

$$\mathbf{r}_g(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) = \mathbf{S}_g^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \quad (4.3c)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{Tg}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) = & \frac{1}{c_g c_p^g} [St_{sg} h_{sg}(\boldsymbol{\eta})(\eta_s - \eta_g) - St_{gw} h_{gw}(\boldsymbol{\eta})(\eta_g - \eta_w)] - \\ & \frac{1}{c_g c_p^g} \left[\alpha_g \sum_{j=1}^{NRg} B_j D a_j r_j(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \right] \end{aligned} \quad (4.3d)$$

donde las m reacciones se han clasificado en NRs reacciones heterogéneas desarrolladas en la partícula y NRg reacciones homogéneas del gas. $\mathbf{D} \mathbf{a}$ es una matriz diagonal que contiene los m números Damkholer ($D a_j$), \mathbf{B}_r el vector de los m incrementos adiabáticos de temperatura (B_j), y el vector de las velocidades de reacción en términos de las variables adimensionales

son escritos a continuación:

$$\mathbf{r} = [r_1, r_2, \dots, r_m]^T; r_j(\mathbf{c}, \eta) = \frac{\mathcal{R}_j(\mathbf{C}, T)}{\mathcal{R}_j(\mathbf{C}_{g0}, T_{n0})}$$

$$\mathbf{C}_{g0} = [C_{g0}, C_{g0}, \dots, C_{g0}]^T \quad (4.3e)$$

Los operadores de frontera espacial están dados por las siguientes expresiones:

$$\beta_g\{\mathbf{x}\} := \frac{D_M}{Pe_M} \partial_z \mathbf{x} - v_g [\mathbf{x} - \mathbf{x}_e] \quad (4.4a)$$

$$\beta_s\{\mathbf{x}\} := \mathbf{x} - \mathbf{x}_e \quad (4.4b)$$

$$\beta_{Hg}\{\eta_g\} := \frac{D_H^g}{Pe_H^g} \partial_z \eta_g - u_g [\eta_g - \eta_e] \quad (4.4c)$$

$$\beta_{Hs}\{\eta_s\} := \frac{D_H^s}{Pe_H^s} \partial_z \eta_s - u_s [\eta_s - \eta_e] \quad (4.4d)$$

Los operadores de transporte son:

$$\tau_g^C\{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z (v_g(\mathbf{c}, \eta) \mathbf{x}) \quad (4.5a)$$

$$\tau_g^D\{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := \partial_z (D_M(\mathbf{c}, \eta) \partial_z \mathbf{x}) \quad (4.5b)$$

$$\tau_s^C\{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z (v_s(\mathbf{c}, \eta) \mathbf{x}) \quad (4.5c)$$

$$\tau_{Hs}^C\{\eta_s\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z (v_s(\mathbf{c}, \eta) \eta_s) \quad (4.5d)$$

$$\tau_{Hg}^C\{\eta_g\}(\mathbf{c}, \eta) := \frac{1}{c_g c_p^g} \left[-\partial_z (v_g(\mathbf{c}, \eta) c_g c_p^g (\eta_g - \eta_0)) + \partial_z [v_g(\mathbf{c}, \eta) c_g c_p^g] (\eta_g - \eta_0) \right] \quad (4.5e)$$

$$\tau_{Hg}^D\{\eta_g\}(\mathbf{c}, \eta) := \frac{1}{c_g c_p^g} \partial_z (c_g c_p^g D_{Hg}(\mathbf{c}, \eta) \partial_z \eta_g) \quad (4.5f)$$

$$\tau_{Hs}^C\{\eta_s\}(\mathbf{c}, \eta) := \frac{1}{c_s c_p^s} \left[-\partial_z (v_s(\mathbf{c}, \eta) c_s c_p^s (\eta_s - \eta_0)) + \partial_z [v_s(\mathbf{c}, \eta) c_s c_p^s] (\eta_s - \eta_0) \right] \quad (4.5g)$$

$$\tau_{Hs}^D\{\eta_s\}(\mathbf{c}, \eta) := \frac{1}{c_s c_p^s} \partial_z (c_s c_p^s D_{Hs}(\mathbf{c}, \eta) \partial_z \eta_s) \quad (4.5h)$$

La forma adimensional del modelo distribuido del gasificador (4.2) ha sido obtenida con base en el hecho de que el tiempo de residencia promedio de una partícula sólida de biomasa o carbón mineral ($\tau_s = \frac{L}{v_{s0}} = O(1000s)$) es mucho mayor al tiempo de residencia promedio del gas ($\tau_g = \frac{L}{v_{g0}} = O(1s)$) en un reactor de lecho empacado.

En consecuencia, el modelo normalizado (4.2) constituye la forma estándar de perturbaciones singulares del modelo distribuido del gasificador de lecho móvil, donde $\varepsilon = \frac{u_{s0}}{u_{g0}} = O(10^{-3})$ es el parámetro singular pequeño del modelo. En esta representación es posible

identificar las diferentes escalas de variación de los términos transporte y de generación de las ecuaciones de balance, así como, su contribución relativa en el modelo.

De acuerdo al análisis basado en perturbaciones singulares, el modelo estándar (4.2) evidencia una separación de las escalas de tiempo cuando se toma el límite si $\varepsilon \rightarrow 0$ del mismo. Entonces, la escala de tiempo rápida del sistema aparece como una capa límite inicial en las variables de temperatura del gas y concentraciones molares de los componentes del gas cuyo comportamiento está determinado por los balances (4.2c) y por el balance de entalpía del gas (4.2d). En consecuencia, las variables rápidas del sistema son las concentraciones de las componentes gaseosas y la temperatura (entalpía) del gas.

Por otra parte, las variables lentas del sistema distribuido del gasificador son la temperatura de la partícula y las concentraciones de las especies químicas del sólido.

4.2. Modelo distribuido de orden reducido.

La escala lenta y dominante del sistema está descrita por los balances de masa de las componentes sólidas y de la energía del sólido en el modelo general de orden reducido (4.6) del reactor de gasificación, el cual se obtiene al despreciar el efecto de la perturbación $\varepsilon = 0$ en el modelo adimensional (4.2). Es por ello que el modelo reducido es conocido también como el modelo nominal en la escala lenta t del modelo original (2.4).

Entonces, el modelo dinámico de orden reducido del reactor está constituido por los balances de masa de las n_s componentes sólidas y el balance de energía de la partícula de un sistema de $n_s + 1$ representados por el sistema de EDPs sobre los dominios espacial axial ($0 < z < 1$) y temporal ($t > 0$):

$$\partial_t \bar{\mathbf{c}}_s = \tau_s^C \{ \bar{\mathbf{c}}_s \} (\bar{\mathbf{c}}, \bar{\boldsymbol{\eta}}) + \mathbf{r}_s(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\boldsymbol{\eta}}) := \mathbf{F}_s(\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\mathbf{c}}_g, \bar{\boldsymbol{\eta}}_s, \bar{\boldsymbol{\eta}}_g) \quad (4.6a)$$

$$\partial_t \bar{\boldsymbol{\eta}}_s = \tau_{H_s}^C \{ \bar{\boldsymbol{\eta}}_s \} (\bar{\mathbf{c}}, \bar{\boldsymbol{\eta}}) + \frac{1}{Pe_H^s} \tau_{H_s}^D \{ \bar{\boldsymbol{\eta}}_s \} (\bar{\mathbf{c}}, \bar{\boldsymbol{\eta}}) + \mathcal{Q}_{T_s}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\boldsymbol{\eta}}) := F_h(\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\mathbf{c}}_g, \bar{\boldsymbol{\eta}}_s, \bar{\boldsymbol{\eta}}_g) \quad (4.6b)$$

y las condiciones de frontera e iniciales:

$$z = 0: \quad \beta_s \{ \bar{\mathbf{c}}_s \} = 0, \quad \beta_{H_s} \{ \bar{\boldsymbol{\eta}}_s \} = 0 \quad (4.6c)$$

$$z = 1: \quad \partial_z \bar{\mathbf{c}}_s = 0, \quad \partial_z \bar{\boldsymbol{\eta}}_s = 0 \quad (4.6d)$$

$$t = 0: \quad \bar{\mathbf{c}}_s(z, 0) = \frac{\mathbf{C}_{sic}}{C_{s0}}, \quad \bar{\boldsymbol{\eta}}_s(z, 0) = \frac{T_{sic}}{T_{s0}} \quad (4.6e)$$

El sistema dinámico distribuido (4.6a)-(4.6b) se encuentra acoplado con los balances de masa y energía del gas en estado estacionario modelados mediante el sistema de $n_g + 1$ EDOs

de segundo grado en el dominio espacial axial ($0 < z < 1$):

$$0 = \tau_g^C \{\bar{\mathbf{c}}_g\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \frac{1}{Pe_M} \tau_g^D \{\bar{\mathbf{c}}_g\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \mathbf{r}_g(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) \quad (4.6f)$$

$$0 = \tau_{Hg}^C \{\bar{\eta}_g\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \frac{1}{Pe_H^g} \tau_{Hg}^D \{\bar{\eta}_g\}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) + \mathcal{Q}_{Tg}(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\eta}) \quad (4.6g)$$

con condiciones de frontera:

$$z = 0 : \quad \beta_g \{\bar{\mathbf{c}}_g\} = 0 \quad \beta_{Hg} \{\bar{\eta}_g\} = 0 \quad (4.6h)$$

$$z = 1 : \quad \partial_z \bar{\mathbf{c}}_g = 0, \quad \partial_z \bar{\eta}_g = 0 \quad (4.6i)$$

Los operadores de frontera y de transporte adimensionales son definidos en las ecuaciones (4.4)-(4.5), y los términos fuente están dados por las expresiones de (4.3).

Una solución del sistema de EDOs con condiciones de frontera (4.6f)-(4.6g) definen perfiles espaciales en estado estacionario de las concentraciones de las componentes del gas y de su temperatura parametrizados en las variables lentas $\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\eta}_s$, como se evidencia en las ecuaciones (4.7)-(4.8).

$$\bar{\mathbf{c}}_{gss}(z, t) := \bar{\mathbf{c}}_g(\bar{\mathbf{c}}_s(z, t), \bar{\eta}_s(z, t)) = \mathbf{y}_g(\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\eta}_s) \quad (4.7)$$

$$\bar{\eta}_{gss}(z, t) := \bar{\eta}_g(\bar{\mathbf{c}}_s(z, t), \bar{\eta}_s(z, t)) = y_h(\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\eta}_s) \quad (4.8)$$

donde $\bar{\mathbf{c}}_{gss}(z, t)$ es el vector que contiene los perfiles espaciales en estado cuasiestacionario de las n_g^R especies gaseosas y $\bar{\eta}_{gss}(z, t)$ es el perfil espacial en estado cuasiestacionario de la temperatura del gas.

Dicha solución estacionaria $(\bar{\mathbf{c}}_g, \bar{\eta}_g)$ se sustituye en el sistema de ecuaciones diferenciales parciales (4.6a)-(4.6b) para obtener el modelo dinámico de orden reducido correspondiente:

$$\partial_t \bar{\mathbf{c}}_s = \mathbf{F}_s(\bar{\mathbf{c}}_s, \mathbf{y}_g(\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\eta}_s), \bar{\eta}_s, y_h(\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\eta}_s)) \quad (4.9a)$$

$$\partial_t \bar{\eta}_s = F_h(\bar{\mathbf{c}}_s, \mathbf{y}_g(\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\eta}_s), \bar{\eta}_s, y_h(\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\eta}_s)) \quad (4.9b)$$

con las condiciones de frontera e iniciales (4.6c)-(4.6e).

En consecuencia, las variables rápidas $(\bar{\mathbf{c}}_g, \bar{\eta}_g)$ están en estado cuasiestacionario porque su estado estacionario (4.7)-(4.8) está cambiando lentamente debido a que éste depende de las variables de variación lenta: $(\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\eta}_s)$. Por lo tanto, su comportamiento a largo plazo, después de un intervalo de tiempo correspondiente a la rápida variación (capa límite inicial), está determinado por el comportamiento dinámico de las variables lentas $(\bar{\mathbf{c}}_s, \bar{\eta}_s)$.

En conclusión, la dinámica esencial del modelo distribuido es dictada por las variables lentas del sistema: las concentraciones de las componentes sólidas y la entalpía (temperatura) del sólido.

De acuerdo a la teoría de perturbaciones singulares, las variables de concentración y

temperatura de ambas fases del modelo reducido $(\bar{\mathbf{c}}, \bar{\boldsymbol{\eta}})$ están relacionadas con las del modelo completo $(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta})$ mediante las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_s(z, t) &= \bar{\mathbf{c}}_s(z, t) + O(\varepsilon), \quad \forall t \in [0, t_1] \\ \eta_s(z, t) &= \bar{\eta}_s(z, t) + O(\varepsilon), \quad \forall t \in [0, t_1] \\ \mathbf{c}_g(z, t) &= \bar{\mathbf{c}}_g(z, t) + O(\varepsilon), \quad \forall t \in [t_\varepsilon, t_1] \\ \eta_g(z, t) &= \bar{\eta}_g(z, t) + O(\varepsilon), \quad \forall t \in [t_\varepsilon, t_1], \quad t_\varepsilon = O(\varepsilon) > 0 \end{aligned}$$

De acuerdo a lo anterior, las condiciones iniciales correspondientes a las concentraciones y temperatura del gas han sido eliminadas ya que se considera que dichas variables convergen a su estado estacionario (4.6f)-(4.6g) con una velocidad infinita. Sin embargo, la validez de ésta afirmación depende del comportamiento de las variables rápidas en la capa límite inicial, cuyo modelo es obtenido en la siguiente subsección.

4.3. Modelo distribuido de capa límite.

El modelo que describe el comportamiento de las concentraciones y temperaturas de ambas fases en la escala de tiempo rápida $\tau = t/\varepsilon$ del modelo distribuido del reactor de gasificación (4.2) está dado por el siguiente sistema de EDPs:

$$\partial_\tau \mathbf{c}_s = \varepsilon \left[\tau_s^C \{ \mathbf{c}_s \}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \mathbf{r}_s(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \right] \quad (4.11a)$$

$$\partial_\tau \eta_s = \varepsilon \left[\tau_{H_s}^C \{ \eta_s \}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{Pe_H^s} \tau_{H_s}^D \{ \eta_s \}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \mathcal{Q}_{T_s}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \right] \quad (4.11b)$$

$$\partial_\tau \mathbf{c}_g = \tau_g^C \{ \mathbf{c}_g \}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{Pe_M} \tau_g^D \{ \mathbf{c}_g \}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \mathbf{r}_g(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \quad (4.11c)$$

$$\partial_\tau \eta_g = \tau_{H_g}^C \{ \eta_g \}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{Pe_H^g} \tau_{H_g}^D \{ \eta_g \}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) + \mathcal{Q}_{T_g}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\eta}) \quad (4.11d)$$

Dicho modelo está sujeto a las condiciones iniciales y de frontera adimensionales correspondientes.

El modelo de capa límite (4.12) surge de despreciar el parámetro de perturbación $\varepsilon = 0$ en el modelo del reactor en la escala de tiempo rápida (4.11), es decir, es el modelo nominal simplificado en la escala de tiempo rápida del modelo original.

$$\partial_\tau \tilde{\mathbf{c}}_s = 0 \quad (4.12a)$$

$$\partial_\tau \tilde{\eta}_s = 0 \quad (4.12b)$$

$$\partial_\tau \tilde{\mathbf{c}}_g = \tau_g^C \{\tilde{\mathbf{c}}_g\}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}) + \frac{1}{Pe_M} \tau_g^D \{\tilde{\mathbf{c}}_g\}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}) + \mathbf{r}_g(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}) \quad (4.12c)$$

$$\partial_\tau \tilde{\eta}_g = \tau_{Hg}^C \{\tilde{\eta}_g\}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}) + \frac{1}{Pe_H^g} \tau_{Hg}^D \{\tilde{\eta}_g\}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}) + \mathcal{Q}_{Tg}(\tilde{\mathbf{c}}, \tilde{\eta}) \quad (4.12d)$$

sujeto a las condiciones iniciales y de frontera correspondientes:

$$z = 0 : \quad \beta_g \{\tilde{\mathbf{c}}_g\} = 0, \quad \beta_s \{\tilde{\mathbf{c}}_s\} = 0, \quad \beta_{Hg} \{\tilde{\eta}_g\} = 0, \quad \beta_{Hs} \{\tilde{\eta}_s\} = 0 \quad (4.12e)$$

$$z = 1 : \quad \partial_z \tilde{\mathbf{c}}_g = 0, \quad \partial_z \tilde{\mathbf{c}}_s = 0, \quad \partial_z \tilde{\eta}_g = 0, \quad \partial_z \tilde{\eta}_s = 0 \quad (4.12f)$$

$$\begin{aligned} \tau = 0 : \quad \tilde{\mathbf{c}}_s(z, 0) &= \frac{\mathbf{C}_{sic}}{C_{s0}} := \mathbf{c}_{sic}, \quad \tilde{\eta}_s(z, 0) = \frac{T_{sic}}{T_{s0}} := \eta_{sic}, \\ \tilde{\mathbf{c}}_g(z, 0) &= \frac{\mathbf{C}_{gic}}{C_{g0}}, \quad \tilde{\eta}_g(z, 0) = \frac{T_{gic}}{T_{g0}} \end{aligned} \quad (4.12g)$$

De acuerdo al modelo (4.12), en la capa límite inicial las variables lentas ($\tilde{\mathbf{c}}_s, \tilde{\eta}_s$) están congeladas en sus condiciones iniciales (4.12g), las cuales definen perfiles espaciales iniciales. De esta manera, este subsistema se encuentra desacoplado en el tiempo de las variables lentas, es decir, la evolución temporal de las concentraciones y temperatura del sólido no afecta el comportamiento de las variables rápidas en la capa límite denotadas como ($\tilde{\mathbf{c}}_g, \tilde{\eta}_g$). Entonces, el modelo de capa límite sólo describe el comportamiento de la componente de rápida variación del modelo completo, la cual sólo está presente en las concentraciones de las componentes y entalpía del gas:

$$\begin{aligned} \partial_\tau \tilde{\mathbf{c}}_g &= \tau_g^C \{\tilde{\mathbf{c}}_g\}(\mathbf{c}_{sic}, \tilde{\mathbf{c}}_g, \eta_{sic}, \tilde{\eta}_g) + \frac{1}{Pe_M} \tau_g^D \{\tilde{\mathbf{c}}_g\}(\mathbf{c}_{sic}, \tilde{\mathbf{c}}_g, \eta_{sic}, \tilde{\eta}_g) + \\ &\quad \mathbf{r}_g(\mathbf{c}_{sic}, \tilde{\mathbf{c}}_g, \eta_{sic}, \tilde{\eta}_g) \end{aligned} \quad (4.13a)$$

$$\begin{aligned} \partial_\tau \tilde{\eta}_g &= \tau_{Hg}^C \{\tilde{\eta}_g\}(\mathbf{c}_{sic}, \tilde{\mathbf{c}}_g, \eta_{sic}, \tilde{\eta}_g) + \frac{1}{Pe_H^g} \tau_{Hg}^D \{\tilde{\eta}_g\}(\mathbf{c}_{sic}, \tilde{\mathbf{c}}_g, \eta_{sic}, \tilde{\eta}_g) + \\ &\quad \mathcal{Q}_{Tg}(\mathbf{c}_{sic}, \tilde{\mathbf{c}}_g, \eta_{sic}, \tilde{\eta}_g) \end{aligned} \quad (4.13b)$$

sujeto a las condiciones iniciales y de frontera correspondientes:

$$z = 0 : \quad \beta_g \{\tilde{\mathbf{c}}_g\} = 0, \quad \beta_{Hg} \{\tilde{\eta}_g\} = 0 \quad (4.13c)$$

$$z = 1 : \quad \partial_z \tilde{\mathbf{c}}_g = 0, \quad \partial_z \tilde{\eta}_g = 0 \quad (4.13d)$$

$$\tau = 0 : \quad \tilde{\mathbf{c}}_g(z, 0) = \frac{\mathbf{C}_{gic}}{C_{g0}}, \quad \tilde{\eta}_g(z, 0) = \frac{T_{gic}}{T_{g0}} \quad (4.13e)$$

El estado estacionario del modelo de capa límite está dado por la expresión:

$$\tilde{\mathbf{c}}_{gss}(z, \tau) = \mathbf{y}_g(\mathbf{c}_{sic}, \eta_{sic}) \quad (4.14)$$

$$\tilde{\eta}_{gss}(z, \tau) = y_h(\mathbf{c}_{sic}, \eta_{sic}) \quad (4.15)$$

El comportamiento dinámico a largo plazo (cuando $\tau \rightarrow \infty$) del modelo de capa límite definirá la validez del modelo de orden reducido porque para un tiempo finito t después de la capa límite inicial $\tau \rightarrow \infty$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$. Por lo tanto, la existencia, unicidad y estabilidad del estado estacionario (4.14)-(4.15) del subsistema rápido de capa límite (4.13) son propiedades fundamentales que constituyen condiciones suficientes para la validez del modelo reducido. Específicamente, si el estado estacionario (4.14)-(4.15) del modelo de capa límite es único, exponencial y uniformemente estable en (\mathbf{c}_s, η_s) , entonces se garantiza que (4.10) y que $\forall t \in [0, t_1]$:

$$\mathbf{c}_s(z, t) = \bar{\mathbf{c}}_s(z, t) + O(\varepsilon)$$

$$\eta_s(z, t) = \bar{\eta}_s(z, t) + O(\varepsilon)$$

$$\mathbf{c}_g(z, t) = \hat{\mathbf{c}}_g(z, t) + \bar{\mathbf{c}}_g(z, t) + O(\varepsilon), \quad \hat{\mathbf{c}}_g(z, t) = \tilde{\mathbf{c}}_g(z, \tau) - \mathbf{y}_g(\mathbf{c}_{sic}, \eta_{sic})$$

$$\eta_g(z, t) = \hat{\eta}_g(z, t) + \bar{\eta}_g(z, t) + O(\varepsilon), \quad \hat{\eta}_g(z, t) = \tilde{\eta}_g(z, \tau) - y_h(\mathbf{c}_{sic}, \eta_{sic})$$

donde $(\hat{\mathbf{c}}_g, \hat{\eta}_g)$ es la respuesta transitoria inicial rápida en la capa límite de las variables de concentración y temperatura del gas.

La hipótesis de estado cuasiestacionario para las variables de temperatura y concentraciones de especies de la fase gas produce un modelo distribuido de orden reducido (4.6), el cual constituye una aproximación simplificada del modelo original (4.2). El análisis de perturbaciones singulares realizado en esta sección es el fundamento sistemático de dicha hipótesis, en el sentido de que proporciona un estimado del error de la aproximación y bajo qué condiciones se garantiza dicha estimación, es decir, la validez del modelo reducido.

4.4. Equilibrio térmico entre fases.

Las variables rápidas (\mathbf{C}_g, T_g) del modelo distribuido del reactor de gasificación (2.4) exhiben un comportamiento en dos escalas de tiempo: un transitorio rápido en una capa límite inicial y una respuesta lenta para el resto del tiempo, de acuerdo al análisis de perturbaciones

singulares con el parámetro $\varepsilon = \frac{u_{s0}}{u_{g0}}$. Es decir, la separación en dos escalas de tiempo del sistema es una consecuencia de la diferencia de velocidades de flujo axial entre las fases, la cual es, a su vez, causada por la diferencia de densidades entre las fases ($C_s \gg C_g$).

Además de la capa límite inicial en los perfiles temporales de las variables del modelo del gasificador, éstas pueden mostrar capas límites de frontera e internas en sus perfiles espaciales debido a la coexistencia de procesos físico-químicos rápidos (reacciones de combustión, pirólisis, intercambio de calor entre fases, etc.) y lentos (reacciones de gasificación) en el término fuente de las ecuaciones de balance de masa y energía. Una hipótesis simplificante que reproduzca el comportamiento esencial de las variables del modelo puede ser deducida y analizada desde el punto de vista de perturbaciones singulares para reactores donde prevalece la convección (Countou-Carrere y Daoutidis, 2008). Sin embargo, no es posible una extensión directa de dicho método de reducción de modelo para reactores donde el transporte por convección y difusión o dispersión son comparables.

Esta subsección se enfoca en la hipótesis simplificante de equilibrio térmico entre fases en el modelo distribuido (2.4) del reactor de gasificación, la cual se debe a la rápida transferencia de calor entre la partícula y el gas circundante en relación al tiempo de residencia promedio del gas. Este hecho se evidencia en el modelo adimensional (4.2) con un número de Stanton de interfase grande $St_{sg} \gg 1$.

El intercambio de calor por convección y radiación entre las fases es poco en la mayor parte del reactor excepto en una zona muy reducida (capa límite de frontera) cerca de la entrada (cima) de un gasificador de flujos descendentes concurrentes por lo que el promedio espacial de la diferencia entre las dos temperaturas es bajo, alrededor de 5°C de acuerdo al estudio realizado por Gobel *et al.* (2007). Por lo tanto, la zona de mayor diferencia entre las temperaturas sólo se desarrolla en la zona de combustión del reactor. Sin embargo, de acuerdo a los estudios de (Amundson y Arri, 1978; Caram y Fuentes, 1982) en un reactor de gasificación de flujos en contracorriente existen dos zonas en las que la diferencia de temperatura entre las fases es importante: (i) en la capa límite de frontera que se forma en la cima del reactor, la cual define la separación entre la zona de precalentamiento del combustible sólido y la zona de gasificación, y (ii) en una capa límite interna ubicada en la separación entre la zona de combustión y zona de precalentamiento del gas, en una vecindad del fondo del reactor.

De acuerdo a las consideraciones anteriores y con el objetivo de obtener un modelo simplificado con sensibilidad reducida, se supone que la velocidad de transferencia de calor entre fases es infinita y por lo tanto las temperaturas son iguales. El modelo simplificado resultante de la hipótesis simplificante de equilibrio térmico se obtiene al igualar las temperaturas ($T_s = T_g = T$) en las ecuaciones de balance de energía de cada fase (2.4b), (2.4d) del modelo distribuido (2.4) y sumar dichos balances para tener un balance de energía total:

$$\partial_{t'} \mathbf{C}_s = \Gamma_M^s \{ \mathbf{C}_s \} + \mathcal{G}_s(\mathbf{C}, T) \quad (4.16a)$$

$$C_{PT} \partial_{t'} T = \Gamma_H \{ T \} + Q_{RT}(\mathbf{C}, T) - Q_{bw}(T) \quad (4.16b)$$

$$\partial_{t'} \mathbf{C}_g = \Gamma_M^g \{ \mathbf{C}_g \} + \mathcal{G}_g(\mathbf{C}, T) \quad (4.16c)$$

$$C_{PT} = C_s C_p^s + C_g C_p^g \quad (4.16d)$$

Condiciones a la frontera

$$Z = 0: \quad B_M^s \{ \mathbf{C}_s \} = 0, \quad B_M^g \{ \mathbf{C}_g \} = 0, \quad B_H \{ T \} = 0$$

$$Z = L: \quad \partial_Z \mathbf{C}_s = 0, \quad \partial_Z \mathbf{C}_g = 0, \quad \partial_Z T = 0$$

Condiciones iniciales

$$t' = 0: \quad \mathbf{C}_s(Z, 0) = \mathbf{C}_{sic}, \quad \mathbf{C}_g(Z, 0) = \mathbf{C}_{gic}, \quad T(Z, 0) = \alpha_g T_{gic} + \alpha_s T_{sic} := T_{ic} \quad (4.16e)$$

Los términos fuente del modelo simplificado resultante son:

$$\mathbf{G}_\pi(\mathbf{C}, T) = \mathbf{S}_\pi^T \mathcal{R}(\mathbf{C}, T), \quad \pi = g, s \quad (4.17a)$$

$$Q_{RT}(\mathbf{C}, T) = -\Delta \mathbf{H}^T \mathcal{R}(\mathbf{C}, T) \quad (4.17b)$$

$$Q_{bw}(T) = \mathcal{A}_v h_w(T) [T - T_w], \quad \mathcal{A}_v = \frac{4}{D_R}, \quad h_w = h_{sw} + h_{gw} \quad (4.17c)$$

donde C_{PT} es la capacidad calórica total de la partícula y el gas, Q_{RT} es la velocidad de generación de calor por unidad de volumen en el lecho sólido-gas debido a las reacciones, $\Delta \mathbf{H}$ es el vector con los m cambios de entalpía ΔH_j correspondientes a las m reacciones y Q_{bg} es la velocidad de intercambio de calor entre las paredes del reactor y el lecho sólido-gas.

Γ_H (definido en la tabla 4.1) es el operador resultante de transporte convectivo y dispersivo de calor total, u_H es la velocidad convectiva del calor total, \mathcal{D}_H es el coeficiente de dispersión de calor del lecho sólido-gas, λ_T^{eff} es la conductividad térmica efectiva del lecho. Éstos últimos son calculados mediante las ecuaciones (4.18). El operador de frontera de calor total resultante B_H está definido también en la tabla 4.1.

$$\mathbf{u}_H = \mathbf{u}_s + \left(\frac{C_g C_p^g}{C_s C_p^s} \right) \mathbf{u}_g$$

$$\mathcal{D}_H = \mathcal{D}_H^s + \left(\frac{C_g C_p^g}{C_s C_p^s} \right) \mathcal{D}_H^g = \frac{\lambda_T^{eff}}{C_s C_p^s}$$

$$\lambda_T^{eff} = \lambda_s^{eff} + \lambda_g^{eff}$$

El modelo adimensional correspondiente al modelo simplificado (4.16) está dado por el conjunto de PDEs (4.24) en términos de las variables adimensionales:

Tabla 4.1: Operadores del modelo del reactor de lecho móvil (4.16).

Operadores de frontera
$B_M^g\{\mathbf{x}\} := \mathcal{D}_M \partial_Z \mathbf{x} - u_g [\mathbf{x} - \mathbf{x}_e]$ $B_M^s\{\mathbf{x}\} := \mathbf{x} - \mathbf{x}_e$ $B_H\{T\} := \mathcal{D}_H \partial_Z T - u_H [T - T_e]$
Operadores de transporte
$\Gamma_M^g\{\mathbf{x}\}(\mathbf{C}, T) := \partial_Z \left(-u_g(\mathbf{C}, T) \mathbf{x} + \mathcal{D}_M \partial_z \mathbf{x} \right)$ $\Gamma_M^s\{\mathbf{x}\}(\mathbf{C}, T) := \partial_Z \left(-u_s(\mathbf{C}, T) \mathbf{x} \right)$ $\Gamma_H\{T\}(\mathbf{C}, T) := \partial_Z \left(-u_H(\mathbf{C}, T) C_s C_p^s (T - T_0) + \lambda_T^{eff} \partial_Z T \right) + \partial_Z [C_s C_p^s u_H(\mathbf{C}, T)] (T - T_0)$

$$\mathbf{c}_g = \frac{\mathbf{C}_g}{C_{g0}}, \quad \mathbf{c}_s = \frac{\mathbf{C}_s}{C_{s0}}, \quad \eta = \frac{T}{T_{n0}}, \quad \eta_w = \frac{T_w}{T_{n0}}, \quad z = \frac{Z}{L}, \quad t = \frac{u_{s0} t'}{L}, \quad (4.19)$$

$$v_g = \frac{u_g}{u_{g0}}, \quad v_s^n = \frac{u_s}{u_{s0}}, \quad D_M = \frac{\mathcal{D}_M}{\mathcal{D}_{M0}}; \quad D_H = \frac{\mathcal{D}_H}{\mathcal{D}_{H0}}; \quad h_w = \frac{h_w}{h_{bw0}}, \quad (4.20)$$

$$\mathcal{D}_{H0} = \frac{\lambda_0}{C_{s0} C_{p0}}, \quad \eta^0 = \frac{T_0}{T_{n0}} \quad (4.21)$$

y de los números adimensionales:

$$Pe_M = \frac{L u_{g0}}{\mathcal{D}_{M0}}, \quad Pe_H = \frac{L u_{s0}}{\mathcal{D}_{H0}}, \quad St_w = \frac{L h_{w0} A_v}{C_{s0} C_{p0} u_{s0}} \quad (4.22)$$

$$K_M = \frac{C_{g0} u_{g0}}{C_{s0} u_{s0}}, \quad Da_j = \frac{L R_j(\mathbf{C}_0, T_{n0})}{u_{g0} C_{g0}}, \quad B_j = \frac{\Delta H_j^r}{C_{p0} T_{n0}} \quad (4.23)$$

donde Pe_H es el número de Peclet de calor del lecho y St_w es el número de Stanton de la pared del reactor con el lecho.

$$\partial_t \mathbf{c}_s = \tau_s^C \{\mathbf{c}_s\}(\mathbf{c}, \eta) + \mathbf{r}_s(\mathbf{c}, \eta) \quad (4.24a)$$

$$H_T \partial_t \eta = \tau_H^C \{\eta\}(\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{Pe_H} \tau_H^D \{\eta\}(\mathbf{c}, \eta) + Q_T(\mathbf{c}, \eta) \quad (4.24b)$$

$$\varepsilon \partial_t \mathbf{c}_g = \tau_g^C \{\mathbf{c}_g\}(\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{Pe_M} \tau_g^D \{\mathbf{c}_g\}(\mathbf{c}, \eta) + \mathbf{r}_g(\mathbf{c}, \eta) \quad (4.24c)$$

$$\mathbf{c} = [\mathbf{c}_s^T, \mathbf{c}_g^T]^T, \quad \mathbf{C}_\pi = \mathbf{c}_\pi C_{\pi 0}, \quad T = \eta T_{n0}, \quad \pi = g, s \quad (4.24d)$$

con condiciones iniciales y de frontera adimensionales:

$$z = 0 : \quad \beta_g\{\mathbf{c}_g\} = 0, \quad \beta_s\{\mathbf{c}_s\} = 0, \quad \beta_H\{\eta\} = 0 \quad (4.24e)$$

$$z = 1 : \quad \partial_z \mathbf{c}_g = 0, \quad \partial_z \mathbf{c}_s = 0, \quad \partial_z \eta = 0 \quad (4.24f)$$

$$t = 0 : \quad \mathbf{c}_s(z, 0) = \frac{\mathbf{C}_{sic}}{C_{s0}}, \quad \mathbf{c}_g(z, 0) = \frac{\mathbf{C}_{gic}}{C_{g0}}, \quad \eta(z, 0) = \frac{\alpha_g T_{gic} + \alpha_s T_{sic}}{T_{n0}} := \frac{T_{ic}}{T_{n0}} \quad (4.24g)$$

donde los operadores de frontera adimensionales son definidos en las ecuaciones (4.31)-(4.33) y los términos fuente están dados por las expresiones:

$$\mathbf{r}_s(\mathbf{c}, \eta) = K_M \mathbf{S}_s^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{c}, \eta) \quad (4.24h)$$

$$\mathcal{Q}_T(\mathbf{c}, \eta) = K_M [-St_w h_w(\eta) [\eta - \eta_w] - \mathbf{B}_r^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{c}, \eta)] \quad (4.24i)$$

$$\mathbf{r}_g(\mathbf{c}, \eta) = \mathbf{S}_g^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{c}, \eta) \quad (4.24j)$$

Los operadores de transporte adimensionales τ son:

$$\tau_g^C\{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z (\mathbf{v}_g(\mathbf{c}, \eta) \mathbf{x}) \quad (4.25)$$

$$\tau_g^D\{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := \partial_z (D_M(\mathbf{c}, \eta) \partial_z \mathbf{x}) \quad (4.26)$$

$$\tau_s^C\{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z (\mathbf{v}_s(\mathbf{c}, \eta) \mathbf{x}) \quad (4.27)$$

$$\tau_H^C\{\eta\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z (c_s c_p^s v_H(\mathbf{c}, \eta) [\eta - \eta^0]) + \partial_z (c_s c_p^s v_H(\mathbf{c}, \eta)) [\eta - \eta^0] \quad (4.28)$$

$$\tau_H^D\{\eta\}(\mathbf{c}, \eta) := \partial_z (c_s c_p^s D_H(\mathbf{c}, \eta) \partial_z \eta) \quad (4.29)$$

$$\mathbf{v}_H = \mathbf{v}_s + K_M \begin{bmatrix} c_p^g c_g \\ c_p^s c_s \end{bmatrix} \mathbf{v}_g \quad (4.30)$$

y los operadores de frontera β son:

$$\beta_g\{\mathbf{x}\} := \frac{D_M}{Pe_M} \partial_z \mathbf{x} - \mathbf{v}_g [\mathbf{x} - \mathbf{x}_{en}] \quad (4.31)$$

$$\beta_s\{\mathbf{x}\} := \mathbf{x} - \mathbf{x}_{en} \quad (4.32)$$

$$\beta_H\{\eta\} := \frac{D_H}{Pe_H} \partial_z \eta - \mathbf{v}_H [\eta - \eta_{en}] \quad (4.33)$$

donde H_T es la capacidad térmica total del lecho dada por la siguiente expresión:

$$H_T = c_p^s c_s + \varepsilon K_M c_p^g c_g$$

Una ventaja de la hipótesis de equilibrio térmico entre fases es que la simulación numérica del modelo simplificado adimensional (4.24) es robusta (sensibilidad reducida a errores de redondeo y discretización) y computacionalmente eficiente con relación al modelo completo (2.4) debido a la reducción de la rigidez numérica del modelo resultando en un problema mejor condicionado.

En este capítulo se han empleado métodos de perturbaciones singulares para la reducción de orden y simplificación del modelo distribuido de dispersión del reactor de gasificación de lecho empacado (2.4). La aplicación concurrente de la hipótesis de estado cuasiestacionario para la fase gas y la hipótesis de equilibrio térmico al modelo completo del gasificador de n_s+n_g+2 EDPs (2.4) produce un modelo distribuido reducido de n_s+1 EDPs con condiciones iniciales y de frontera, y n_g EDOs con valor a la frontera. Dado que el modelo resultante es de dimensión infinita es necesario desarrollar un modelo en parámetros concentrados (sistema de EDOs) que aproxime su comportamiento. En el capítulo siguiente se aborda dicho problema al deducir un modelo que reproduzca las características esenciales del comportamiento de sistemas de procesos distribuidos y dimensión infinita como los modelos de transporte de reactores tubulares y de lecho empacado mediante un conjunto de subsistemas dinámicos de parámetros concentrados.

Capítulo 5

Representación en dimension finita del reactor de gasificación.

Dado que el objetivo principal de esta tesis consiste en desarrollar un método de diseño de modelos de orden reducido, es necesario obtener una estructura de modelo simple, de dimensión finita y con sentido físico. En este sentido, el presente capítulo aborda el problema de capturar la naturaleza distribuida de sistemas de procesos como el gasificador de lecho empacado mediante un modelo dinámico en parámetros concentrados con una estructura tan simple como sea posible en relación al propósito de modelado y del reactor específico.

En consecuencia, el objetivo de este capítulo se enfoca en deducir un modelo dinámico en parámetros concentrados que capture la naturaleza distribuida del reactor de gasificación con un grado de precisión adecuado de acuerdo al propósito de modelado y a la luz de la incertidumbre del sistema.

Primero se presenta el fundamento metodológico del esquema de modelado en dimensión finita de sistemas de procesos distribuidos como el reactor de gasificación de lecho empacado. Posteriormente, se realiza una revisión del método clásico de agregación de modelo (lumping) basado en un tren de RCTAs o modelo de celdas y su relación con los métodos de discretización espacial aplicados a modelos distribuidos de procesos para su análisis numérico mediante el método de líneas. Después, se da un panorama general de los esquemas de discretización espacial del modelo distribuido de un sistema de procesos, sus fuentes de error y la forma en la que capturan los aspectos determinantes de los fenómenos de transporte de masa y energía del sistema distribuido. Se concluye el capítulo con la aplicación del método de diferencias finitas a los operadores de transporte del modelo distribuido del reactor y su reformulación como un tren de RCTAs con retromezclado de calor y masa.

5.1. Bases metodológicas.

La base conceptual del método de modelado propuesto está en la posibilidad de aproximar el comportamiento de sistemas dinámicos de dimensión infinita mediante sistemas de

parámetros concentrados del orden más bajo posible determinado por el nivel de precisión requerido por el objetivo de modelado. Cuatro fundamentos metodológicos provenientes de la dinámica de fluidos computacional y de la ingeniería de reacciones químicas sustentan esta afirmación:

1. *El método de líneas.* Es un método extendido de análisis de modelos en EDPs con condiciones iniciales y de frontera que consta de dos componentes principales. Primero, se realiza la discretización del dominio espacial en una malla numérica de nodos o elementos distribuidos de acuerdo a un espaciamiento estático o dinámico. Posteriormente, se sustituyen los operadores de transporte del sistema de EDPs (2.4) por aproximaciones algebraicas de las derivadas espaciales obtenidas mediante un método numérico de diferencias finitas o elemento finito. La variable independiente del tiempo no se discretiza en este análisis por lo que el modelo en EDPs se reduce a un sistema de EDOs con valores iniciales que aproxima su comportamiento (Schiesser y Griffiths, 2009).
2. *La propiedad de convergencia del método numérico.* Los métodos de discretización espacial aproximan el comportamiento distribuido del modelo en EDPs mediante un arreglo de N subsistemas o elementos de parámetros concentrados con volumen V_k donde $k = 1, 2, 3, \dots, N$. Cada esquema numérico produce un modelo en parámetros concentrados con configuración o estructura particular, la cual está definida por el número de subsistemas N y el grado de interacción entre ellos. La capacidad del modelo en parámetros concentrados de reproducir el comportamiento del sistema distribuido con un nivel de precisión determinado es caracterizada por propiedades fundamentales de los métodos numéricos ampliamente estudiadas como consistencia, estabilidad, convergencia y conservación (Ferziger y Peric, 2002). Específicamente un método convergente es capaz de producir una solución aproximada del modelo continuo con una precisión que aumenta conforme N se incrementa. En modelos continuos lineales, la estabilidad y la consistencia son propiedades que constituyen condiciones suficientes y necesarias para la convergencia de un método de discretización. Sin embargo, en sistemas no lineales como el modelo distribuido de procesos (2.2) la demostración de propiedades como convergencia y estabilidad es compleja, por lo que se comparan las soluciones aproximadas obtenidas con un método numérico utilizando varias mallas y varios N . Los métodos que tienen estas propiedades generan modelos que capturan aspectos cualitativos del modelo distribuido con independencia de N y la malla espacial seleccionada.
3. *Volumen finito o volumen de control.* Es una clase de métodos de discretización espacial que preservan el carácter conservativo y sentido físico de las ecuaciones de balance del sistema distribuido y producen una estructura de modelo simple en términos de la interconexión de los elementos espaciales discretos. Una implicación fundamental de lo anterior es que se reproduce el comportamiento distribuido conservativo con un

grado de precisión aceptable utilizando incluso un número reducido de elementos o nodos discretos espaciales.

4. *Modelos de N tanques agitados.* La naturaleza distribuida de los sistemas de procesos químicos representados con el modelo unidimensional (2.2) se puede reproducir mediante la interconexión en cascada de N tanques agitados o mezclados, la cual se asemeja en estructura a un sistema de procesos por etapas como las columnas de destilación o absorción.

5.2. Modelos de N tanques agitados de sistemas distribuidos.

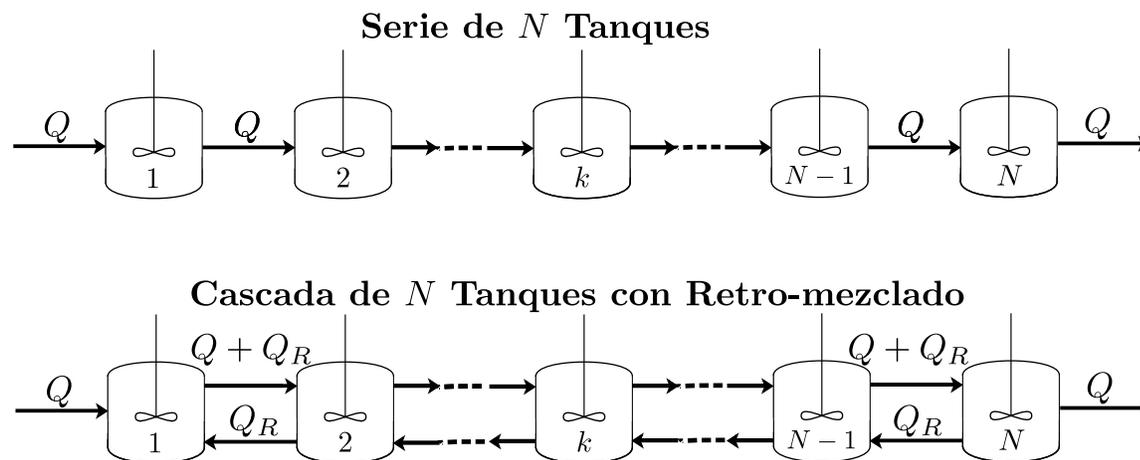


Figura 5.1: Las dos configuraciones utilizadas en los modelos de N tanques: Serie con flujo Q de una vía (arriba) y Cascada con retro-flujo Q_R (abajo).

De acuerdo al esquema de modelado clásico de ingeniería de reactores (Coste *et al.*, 1961) (Levenspiel, 1962), el carácter distribuido de los sistemas de procesos representada mediante modelos macroscópicos de dispersión es capturado con un conjunto de N tanques o celdas agitados interconectados en dos configuraciones generales: serie y cascada-retro-flujo. En equipos de procesos donde los flujos continuamente alimentados reaccionan como en los reactores tubulares de lecho empacado, las celdas son reactores por lo que la unidad fundamental del modelo es un reactor continuo de tanque agitado (RCTA). En la figura (5.1) se presentan ambas interconexiones, las cuales definen dos clases de modelos en parámetros concentrados:

1. **Modelo de tanques en serie (MTS).** El modelo de esta clase que ha sido extensamente utilizado es el que supone que los tanques tienen volumen idéntico. Este modelo tiene una estructura simple y posee un único parámetro de diseño: el número de etapas o celdas mezcladas N (Levenspiel y Bischoff, 1964). Esta configuración se induce al forzar que en la ecuación de balance discretizada espacialmente se elimine

el retromezclado entre etapas (efecto de retroalimentación de masa y/o energía). Esto implica que la difusión numérica aportada por las diferencias finitas centradas es eliminada por la dispersión natural del sistema distribuido (D).

A partir de la eliminación del retromezclado entre celdas se obtiene una expresión que establece una relación inversa entre el número de tanques N y el coeficiente de dispersión D dado un coeficiente de transporte convectivo fijo, por lo que un sistema con dispersión relativamente alta tiene un comportamiento semejante al mostrado por un tren de pocos tanques en serie. Por lo tanto, las ventajas de este modelo en serie respecto a la solución numérica convencional del modelo distribuido de dispersión son significativas únicamente para reactores con dispersión alta. Esta limitación del modelo de tanques en serie se debe a que los efectos del retromezclado por dispersión del modelo distribuido no son traducidos en un retromezclado entre etapas o celdas sino solamente como retromezclado dentro de la celda.

2. **Modelo de tanques en cascada con retro-flujos (MTCR)**. Es un modelo que agrega los efectos de retromezclado inter-etapa a la interconexión en serie de N tanques mediante la introducción de retro-flujos en sentido contrario al flujo principal del proceso (Miyachi y Vermeulen, 1963), Hartland y Mecklenburgh (1966). Dicha estructura constituye un modelo de un tren de tanques agitados con interconexión de dos vías. Las ventajas de este modelo respecto al esquema de tanques en serie simple son: (i) posee mayor flexibilidad ya que se agrega un grado de libertad o parámetro de diseño del modelo, el retro-flujo Q_R (ii) la convergencia del parámetro de retromezclado del modelo de N tanques con retro-flujo al parámetro de dispersión del modelo distribuido es rápida ($1/N^2$), y (iii) las características (los momentos) de la distribución del tiempo de residencia del reactor distribuido con dispersión son aproximadas con una convergencia mayor, es decir, es necesario un menor número de tanques si se ajusta adecuadamente el parámetro de retro-flujo.

Ambos modelos en parámetros concentrados: el MTS y el MTCR son equivalentes al modelo distribuido con dispersión axial unidimensional en el sentido de que ambos modelos son aproximaciones discretas espaciales que pueden ser obtenidas mediante un método numérico de discretización de las derivadas espaciales en los operadores de transporte. En este sentido, las semejanzas entre los modelos concentrados y el reactor distribuido en la literatura clásica de ingeniería de reactores (Deans y Lapidus, 1960), Hartland y Mecklenburgh (1966) fueron establecidas específicamente utilizando un esquema de diferencias finitas centradas de segundo orden para los operadores de transporte de los balances de masa y energía del sistema de procesos.

La interpretación física de la similitud entre el comportamiento de los modelos de N tanques MTS y MTCR, y el modelo del reactor tubular con dispersión tiene su fundamento en la naturaleza estadística y aleatoria del mezclado por dispersión (retromezclado) y su efecto de aplanamiento u homogeneización en los perfiles espaciales de concentración y temperatura en una escala macroscópica del sistema distribuido. El mecanismo de dispersión

se manifiesta como un mezclado rápido en celdas o regiones del tubo producido por remolinos que surgen para tratar de compensar las fluctuaciones aleatorias significativas de las propiedades físicas en las celdas. Por efecto de la agitación rápida natural en las celdas, la variación de las concentraciones y temperaturas es despreciable dentro de ellas en las escalas de tiempo lenta y del espacio macroscópica. Es por ello que el tamaño de las celdas y por lo tanto el número de ellas necesario para reproducir el comportamiento del reactor tubular está en función del grado de dispersión.

De esta manera, un reactor tubular con un lecho empacado de sólidos de volumen V_R , puede ser modelado mediante un arreglo unidimensional de N celdas o elementos mezclados del mismo volumen, el cual está determinado por la porosidad y tamaño de partícula del lecho en relación a la dimension axial del reactor. Tal modelo se basa en la naturaleza heterogénea del lecho empacado y los poros o huecos del mismo a través del cual fluye un fluido. Específicamente, se considera que los espacios vacíos entre las partículas son reactores agitados naturales donde el mezclado es de origen turbulento debido a las grandes diferencias de las velocidades de flujo existentes en ellas (gradientes espaciales axiales y radiales abruptos), es decir, el flujo de un fluido a través del lecho empacado es el responsable de que el sistema se comporte como un conjunto de N celdas mezcladas de un tamaño determinado (Aris y Amundson, 1957).

5.2.1. Criterios de selección de N .

La determinación del grado de mezclado del sistema distribuido de procesos se realiza con frecuencia mediante experimentos que proporcionan una estimación del valor del coeficiente de dispersión D o del número de Peclet. Con el objetivo de obtener un criterio que permita diseñar el número de tanques N del MTS en función del comportamiento del proceso se han deducido expresiones que relacionan el número de tanques N del modelo MTS y la dispersión D del modelo distribuido validado experimentalmente.

De acuerdo al estudio de Kramers y Alberda (1953), en sistemas con baja dispersión las respuestas en frecuencia del modelo distribuido de dispersión y del MTS son semejantes si se elije el número de tanques N de acuerdo a la siguiente relación:

$$N = \frac{uL}{2D} = \frac{Pe}{2} \quad (5.1)$$

donde u es la velocidad de flujo convectiva, L la longitud del tubo, y D el coeficiente de dispersión axial del fluido en el tubo.

El criterio de selección del número de celdas discretas (5.1) se deduce también en el dominio del tiempo a partir de un análisis del error de truncamiento de la serie de Taylor del método de diferencias finitas aplicado al modelo de dispersion Deans y Lapidus (1960). La longitud axial de las celdas, es decir, su tamaño debe ser tal que la variación de las concentraciones y/o temperaturas sea poca en un secciones axiales del tamaño de las celdas para garantizar que el efecto de los términos de alto orden de la aproximación de diferencias finitas sean despreciables a la luz de la precisión requerida por el objetivo de modelado.

5.2.2. Fundamentos metodológicos del modelo de N tanques.

Es posible distinguir tres perspectivas de análisis que fundamentan la capacidad de descripción de los modelos de tanques agitados en serie para reproducir aspectos esenciales y detallados de la dinámica de reactores con un cierto grado de dispersión:

1. **Análisis de respuesta en frecuencia.** La analogía entre los patrones de flujo observados en una serie de N tanques de idéntico volumen y un reactor tubular con dispersión D se ha establecido al observar que las respuestas en frecuencia de concentración de ambos sistemas Kramers y Alberda (1953) son semejantes. En consecuencia, ambos modelos son equivalentes, en el sentido de que sus respuestas en frecuencia se aproximan arbitrariamente si se elige apropiadamente N dado un sistema con dispersión D .
2. **Análisis de la respuesta en el tiempo.** La respuesta al escalón y al impulso de los modelos de N tanques agitados aproximan el comportamiento de la respuesta al escalón e impulso del modelo de dispersión D (Aris y Amundson, 1957). Dichas respuestas son interpretadas como funciones de distribución de probabilidad de los tiempos de residencia del reactor y se caracterizan en función de sus momentos normalizados como el tiempo de residencia promedio (primer momento) y su varianza (segundo momento) (Levenspiel, 1962). De acuerdo a esta teoría, un reactor de naturaleza distribuida con un coeficiente de dispersión dado es similar a la interconexión en serie de N RCTAs, en el sentido de que las varianzas de sus tiempos de residencia son iguales pero las conversiones son solamente semejantes (Levenspiel, 1999). De esta manera, las curvas de la distribución de los tiempos de residencia de una serie de N tanques agitados capturan aspectos esenciales de los patrones de flujo en reactores tubulares con dispersión.
3. **Validación experimental de los modelos.** El esquema clásico de modelado con tanques en serie de ingeniería de reactores (Levenspiel, 1999) identifica los parámetros de su modelo de acuerdo a un procedimiento de dos pasos:
 - a) El parámetro de diseño del modelo de dispersión D o el número de Peclet son deducidos al ajustar su respuesta al impulso o al escalón con las gráficas experimentales de concentración de un efluente en respuesta a la inyección de un pulso o escalón de concentración de un trazador.
 - b) Se ajusta el número de tanques N y por lo tanto, el tamaño de las celdas, de forma que la varianza y el promedio de la distribución de tiempos de residencia de los modelos sean semejantes a los experimentales.

Las tres perspectivas de análisis anteriores suponen que el sistema de procesos es no reactivo o tiene una reacción de primer orden con condiciones isotérmicas de operación, por lo que los modelos resultantes son lineales. Sin embargo, la introducción de efectos no lineales en dicho

modelos, como las reacciones y la variación de temperatura, no limitan la aplicabilidad de los modelos de tanques agitados. Esto se debe a que los modelos en parámetros concentrados surgen de la discretización espacial de los operadores de transporte del balance generalizado (2.2) y los principales efectos no lineales provenientes del término fuente de reacción son considerados en el criterio de selección del parámetro N de diseño de tales modelos como se demuestra en (Deans y Lapidus, 1960) y en (Coste *et al.*, 1961). Dichos estudios clásicos muestran la efectividad del modelo de tanques en serie para un modelo dinámico distribuido bidimensional que considera la variación axial y radial de las concentraciones y temperaturas en reactores no isotérmicos. Un arreglo bidimensional de tanques agitados se deduce de la discretización axial y radial del reactor tubular con dispersión.

Es importante hacer énfasis en la intuición física que han proporcionado los modelos de tanques en serie y en cascada sobre el efecto del transporte por retromezclado en el desempeño de la conversión de los sistemas de procesos y por lo tanto en su productividad. Particularmente, en el campo de los reactores de columna con flujo burbujeante ha influenciado fuertemente su rediseño de una sola etapa continua a un conjunto de secciones separadas por platos con el objetivo de reducir el efecto adverso del mezclado causado por la dispersión axial de las fases gaseosa y líquida en el proceso predominantemente isotérmico (Alvaré y Al-Dahhan, 2006). En dicho estudio, los datos experimentales relacionados con el mezclado de la fase líquido son aproximados mediante el modelo de tanques en cascada y retro-flujos con mayor precisión que con el modelo en parámetros distribuidos de dispersión axial.

El modelo de sistema de N etapas de mezclado con retro-flujos ha sido particularmente eficiente en la descripción del comportamiento de las variables de temperatura y concentración de reactores continuos de dos fases termodinámicas como los reactores de lecho empacado y los reactores de columna burbujeante (Deckwer, 1974). Es por ello que el modelo MTCR es el que se adopta en el presente estudio como estructura base del esquema de diseño de modelo propuesto.

5.3. Métodos numéricos de discretización espacial.

Diversos propósitos de análisis y diseño de los equipos de procesos motivan la realización de pruebas experimentales previas y durante su operación, sin embargo, el costo y nivel de complejidad de los dispositivos e instrumentos necesarios para producir las condiciones deseadas en cada experimento son en general altos y en ocasiones prohibitivos. Es por ello que, el análisis de desempeño y el diseño de equipo, esquemas de control y monitoreo de los sistemas de procesos, son guiados en gran medida por la información que proporcionan modelos formulados con un cierto grado de validez experimental, en el sentido de que describen y explican el comportamiento de variables físicas del proceso, observado en experimentos con condiciones apropiadamente diseñadas. Sin embargo, la solución analítica exacta es inviable en la mayoría de los modelos de sistemas de procesos basados en primeros principios (2.2), por lo que se recurre a la aplicación de métodos numéricos para su estudio y análisis

(Ferziger y Peric, 2002).

El comportamiento de las variables de concentración, temperatura, velocidad de flujo y presión de un sistema de procesos está descrito por la solución exacta de la ecuación de transporte generalizada (2.2), la cual depende continuamente del tiempo y de la coordenada espacial axial. Un enfoque de análisis de dicho modelo generalizado es la aplicación del método de líneas a dicho modelo generalizado, el cual implica la aproximación de la solución exacta mediante un método numérico de discretización espacial. El método de líneas consta de dos partes: (i) el volumen (o longitud axial L) del sistema distribuido V_R se discretiza en un conjunto finito de N secciones axiales con volumen V_k (o longitud axial ΔZ_k), la cual define una partición o malla espacial, y (ii) se obtienen las ecuaciones discretizadas de transporte en cada sección discreta espacial a través de la aplicación del método numérico de discretización espacial seleccionado a la ecuación diferencial de transporte (2.2).

Es importante enfatizar que los nodos de la malla espacial son las ubicaciones a lo largo del reactor donde se calcula la evolución de las concentraciones, temperaturas y velocidades de flujo. Por lo tanto, los valores de estas variables en los nodos constituyen las variables de estado del modelo en parámetros concentrados resultante de la discretización. La forma en la que se discretiza el dominio geométrico espacial determina dos aspectos de la malla espacial generada:

- *Distribución de nodos.* El esquema de espaciamiento de nodos más simple consiste en fijar una equidistribución de los mismos a lo largo del dominio espacial generando una malla uniforme. Cuando los gradientes de los perfiles espaciales son abruptos en ciertas zonas de la geometría se hace evidente la necesidad de un espaciamiento no uniforme de la malla espacial para capturar dichas variaciones con el menor número de nodos posible.
- *Volumen de los elementos discretos.* Existen distintas formas de dividir el volumen total del equipo de procesos y distribuirlo a los N elementos discretos en los que éste se discretiza. En el caso del modelo unidimensional de transporte generalizado (2.2) sólo se discretiza el eje axial del cilindro por lo que es necesario definir las fronteras del volumen de control V_k que rodea a cada nodo con ubicación Z_k de la malla espacial axial, las cuales son las tapas circulares con área A_k de los subcilindros (ver figura 5.2). Es decir, dada una malla espacial con una distribución de nodos determinada es posible asignar un volumen a cada nodo de varias maneras. El esquema de partición más simple del dominio espacial (cilindro) consiste en dividir el volumen total del equipo de procesos en N elementos discretos (subcilindros) a partir de una malla uniforme. Dos formas de ubicar las caras de frontera del volumen que rodea a cada nodo son típicas: (i) las fronteras del volumen están ubicadas a la mitad de la distancia entre dos nodos vecinos, y (ii) los nodos están ubicados en los centroides de los volúmenes Patankar (1980).

El modelo de parámetros concentrados resultante provee el comportamiento dinámico de las concentraciones, temperaturas, velocidades de flujo y presiones en un conjunto de N ubica-

ciones axiales a lo largo del reactor tubular conocidas como nodos o elementos distribuidos de acuerdo a una malla espacial determinada. Convenientemente, el carácter discreto del perfil espacial axial de las variables de dicho modelo tiene una correspondencia directa con el esquema de medición de las variables físicas del reactor. Es decir, el comportamiento de las variables del modelo discreto tiene una relación directa con los datos experimentales de concentraciones, temperaturas y presiones adquiridos mediante un número finito de sensores colocados en posiciones discretas a lo largo del equipo de procesos.

Entre la diversidad de métodos de discretización espacial destacan dos clases principales por su amplia aplicabilidad: (i) diferencias finitas y (ii) elemento finito. El método de volumen finito constituye una tercera clase de esquema de discretización espacial que surge de la combinación de dos formulaciones: método de los residuos ponderados y volumen de control. Este método, consolidado por el grupo de D. B. Spalding, es ampliamente aplicado en el campo de la dinámica de fluidos computacional (DFC) debido a su simplicidad y un conjunto de características que lo hacen atractivo:

- Es un método consistente y conservativo por construcción ya que es aplicado a la forma integro-diferencial de la ecuación de conservación en cada volumen de control y los fluxes de transporte de la superficie de frontera entre de dos volúmenes vecinos son iguales para cada volumen.
- Perfiles de interpolación espacial diferentes pueden ser utilizados para aproximar los fluxes de transporte y el término fuente de la ecuación de conservación.
- El método se ajusta a malla espaciales de geometrías complejas.
- El método es de fácil implementación y las ecuaciones discretizadas resultantes tienen sentido físico directo.

El comportamiento dinámico del sistema distribuido de dimensión infinita (2.2) es aproximado por un conjunto de N subsistemas dinámicos de parámetros concentrados interconectados que definen el comportamiento espacial local de las variables del sistema distribuido en cada sección axial en la que éste es discretizado. Los métodos numéricos de discretización espacial construyen dichos modelos concentrados a partir del modelo distribuido de transporte de acuerdo al siguiente esquema general:

1. **Aproximación del perfil espacial de φ y sus derivadas.** Se propone una hipótesis acerca del comportamiento espacial de φ para aproximar las derivadas espaciales del operador de transporte. Dependiendo del método numérico, la función modelo del perfil espacial puede ser global o continua a trozos, polinomial, senoidal, entre otros. Los métodos más simples y con sentido físico son los que suponen un perfil local en cada sección discreta axial por lo que las N ecuaciones discretizadas resultantes describen el comportamiento dinámico de la variable φ en cada una de las N secciones axiales discretas.

2. **Método de deducción.** El núcleo de los métodos numéricos de discretización espacial está constituido por las diversas metodologías para construir las ecuaciones discretizadas a partir de la ecuación de conservación generalizada (2.2). Entre las formulaciones de discretización espacial más importantes se encuentran:

- *Series polinomiales.* Las derivadas espaciales del operador de transporte son aproximadas al suponer un perfil espacial polinomial de φ . Se plantea una expansión en serie de Taylor de φ en cada nodo de la malla espacial y se trunca dicha serie para lograr una aproximación de orden determinado. Los métodos numéricos de diferencias finitas utilizan extensamente esta formulación para discretizar la forma diferencial de las ecuaciones de conservación (2.2).
- *Principio variacional.* De acuerdo al cálculo de variaciones, resolver una ecuación diferencial es equivalente a minimizar un funcional relacionado. Las ecuaciones discretizadas se obtienen al minimizar dicho funcional en los valores nodales de la variable dependiente φ . Las desventajas de esta formulación son su complejidad y aplicabilidad restringida, debido a que sólo se garantiza la existencia de un funcional para un conjunto particular de ecuaciones diferenciales.
- *Método de los residuos ponderados.* Se aproxima el perfil espacial de φ mediante un modelo (polinomio, seno, etc.) caracterizado por un conjunto de parámetros, los cuales son determinados mediante el conjunto de ecuaciones discretizadas. Estas últimas se construyen al minimizar un criterio o norma del residuo ponderado que se obtiene al sustituir la aproximación del perfil espacial de φ en el modelo en EDP de transporte (2.2). La elección de las funciones de ponderación determina el tipo de método de discretización generado. Los métodos de elemento finito realizan la discretización de una forma integro-diferencial (forma débil) de la ecuación de conservación aplicando este método de deducción.
- *Volumen de control.* El dominio espacial axial es dividido en N volúmenes de control ubicados alrededor de los nodos de malla espacial discreta y la ecuación de transporte (2.2) es integrada en cada volumen de control obteniendo las ecuaciones discretizadas, las cuales describen el principio de conservación de φ en el volumen de control finito, de la misma forma que la ecuación diferencial de transporte describe dicho principio en un volumen de control infinitesimal. Es decir, las ecuaciones discretizadas son ecuaciones de balance que garantizan la conservación de masa, energía y momento en cada volumen de control y por lo tanto, en todo el dominio espacial axial. Esta característica es válida para mallas de cualquier número de nodos, incluso en una malla de muy pocos nodos. Se utilizan funciones de interpolación a trozos que aproximan el perfil espacial entre los nodos de la malla para evaluar las derivadas de los términos de transporte y construir las ecuaciones discretizadas.

Cabe señalar que las interpolaciones del perfil espacial entre los nodos son de carácter constructivo y no restrictivo, ya que uno puede abstraerse de esta supo-

sición sobre el perfil espacial una vez que se han deducido las ecuaciones discretizadas de transporte. Esta idea dota de flexibilidad al método ya que permite utilizar funciones de interpolación espaciales diferentes para aproximar los diferentes términos de la ecuación de balance (2.2): transporte convectivo, dispersivo y término fuente.

5.3.1. Los mecanismos de transporte del modelo discretizado.

Las N EDOs resultantes de la discretización espacial acoplan las interacciones de la variable φ en el nodo i -ésimo con los valores de φ en una cantidad de nodos vecinos determinado por el perfil espacial supuesto y el método de deducción seguido. La naturaleza distribuida del modelo de transporte original es capturada a través de N subsistemas dinámicos de parámetros concentrados interconectados de acuerdo a una estructura de modelo definida por la aproximación de las derivadas espaciales y los fluxes del operador de transporte que realiza el método numérico de discretización espacial.

Un aspecto fundamental de (2.2) que los métodos de discretización espacial deben ser capaces de reproducir son las características del flujo de la cantidad φ que genera la convivencia de dos tipos de transporte: convectivo y dispersivo. Por un lado el transporte advectivo define un patrón de flujo unidireccional con intensidad dada por la velocidad U , mientras que la dispersión produce un flujo bidireccional axial con efecto de retromezclado y una intensidad determinada por el coeficiente D , por el otro. En consecuencia, la importancia relativa del transporte dispersivo en relación al convectivo, dada por el número de Peclet del flujo, caracteriza el patrón de flujo o de transporte desarrollado en una geometría espacial determinada.

En este sentido, algunos métodos numéricos son más adecuados que otros para capturar los fenómenos de transporte de la ecuación de conservación (2.2) en ciertos regímenes de flujo por lo que resulta esencial realizar un análisis del error de aproximación en función del número de Peclet de los métodos numéricos más utilizados para discretizar espacialmente la ecuación de conservación. De acuerdo al estudio de (Patankar, 1980), cada método de discretización espacial describe el comportamiento de φ con una precisión que depende del parámetro Pe del flujo descrito por la ecuación de transporte para una malla espacial dada de N elementos. El efecto más fuerte de Pe sobre el error de discretización se observa en el método diferencias centradas, el cual muestra una desviación amplia en flujos con $Pe > 2$, por lo que dicho método resulta poco adecuado para flujos con transporte por convección dominante sobre difusión ya que para reducir dicho error se requiere un N relativamente grande comparado con otros esquemas como el método de *upwind*.

Dado que los elementos discretos o volúmenes de control tienen fluxes convectivos y difusivos individuales asociados, en cada volumen de control de la malla espacial se tiene un número de Peclet local denotado por Pe_k , el cual está definido en términos de la longitud axial o altura Δz_k . La diferencia entre los dos Peclets se debe a que el esquema de discretización axial introduce un término de transporte difusivo numérico que se suma o resta del transporte difusivo del modelo distribuido. En general el Peclet del modelo distribuido es

distinto al Peclet local del modelo discretizado. Sin embargo, si se modifica Δz_k , aumentando o reduciendo N en el caso de una malla uniforme, el Peclet local de cada volumen de control se puede ajustar de forma que se parezca al Peclet global y reducir de esta manera el efecto de la difusión numérica agregada en el comportamiento del patrón de flujo reproducido. En consecuencia, la estimación de la difusión numérica inducida es una perspectiva distinta de análisis del error que agregan los esquemas de discretización espacial.

Cabe señalar que el tratamiento de la dispersión numérica que lleva a cabo la ingeniería de reactores es diferente de la perspectiva de análisis que ofrece el campo de DFC. Los modelos de tanques MTS y MTCR, obtenidos a partir de la discretización espacial del modelo en EDPs, utilizan la difusión numérica para modelar efectos de retromezclado de flujo no ideal mediante dispersión axial del equipo de procesos, mientras que el usuario de métodos numéricos en el campo de DFC intenta eliminar la difusión numérica de diversas formas: utilizando mallas espaciales densas o un método no lineal de fluxes limitados, entre otros.

En esta tesis se combinan ideas fundamentales de los esquemas de discretización espacial basados en la formulación de volumen de control del campo de DFC y el modelo de tanques en cascada con retro-flujos de la ingeniería de reactores químicos para deducir una estructura de modelo dinámico en parámetros concentrados que constituye la base del método de diseño propuesto a partir del modelo de dimensión infinita de transporte. En este sentido, el modelo de tanques MTCR puede ser generado al aplicar al modelo en EDPs un método numérico de discretización espacial que produzca un modelo dinámico en parámetros concentrados con una estructura constituida por interacciones a vecinos inmediatos únicamente.

El enfoque metodológico del esquema de diseño de modelo propuesto está inspirado en el campo de la ingeniería de reactores en el sentido de que considera que el modelo distribuido de dispersión y el modelo de tanques concentrado son descripciones equivalentes del sistema de procesos a la luz del grado relativamente alto de incertidumbre presente en ambos modelos, en particular para reactores de gasificación. Es decir, los métodos de discretización espacial son interpretados como una herramienta del análisis numérico que relaciona características del modelo distribuido con el modelo en parámetros concentrados del reactor pero no subordinan a priori la capacidad de descripción y predicción del segundo a la del primero, debido a que se reconoce que ambos modelos tienen limitaciones intrínsecas como el nivel de incertidumbre y la sensibilidad de los parámetros.

5.3.2. Sensibilidad, rigidez y su efecto en el modelo discretizado.

La precisión de los resultados provistos por la simulación de modelos continuos distribuidos de dimensión infinita mediante algoritmos numéricos que aproximan su comportamiento con sistemas discretos de dimensión finita está determinada por los siguientes factores:

- La sensibilidad a perturbaciones en parámetros de entrada del modelo continuo. Una medida de la sensibilidad de un modelo o problema es el número de condición, el

cual depende de la derivada del modelo con respecto a las variables de entrada, por ejemplo, el número de condición de un modelo formado por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias es el cociente del máximo y mínimo autovalores de la matriz jacobiana asociada. De esta manera, si el modelo tiene un número de condición grande (mucho mayor a 1) se dice que está mal condicionado.

- La estabilidad del algoritmo numérico. La simulación computacional del modelo continuo introduce un error de discretización determinado, sin embargo, es posible diseñar un algoritmo capaz de preservar la estabilidad y el grado de sensibilidad del modelo continuo. Dicho algoritmo se dice que es numéricamente estable.
- La precisión de la aritmética de representación finita. Dicho parámetro determina los errores de redondeo, cuya propagación a través de la simulación numérica depende del número de condición del modelo y de la estabilidad y sensibilidad del algoritmo.

De lo anterior se concluye que la precisión de la simulación numérica está fuertemente limitada por el grado de sensibilidad o condicionamiento del modelo. Es por ello que aunque se seleccione un método o algoritmo numérico estable los errores de redondeo y discretización pueden amplificarse hasta reducir significativamente la precisión e incluso producir resultados inconsistentes, si el modelo está mal condicionado.

La rigidez es una medida de sensibilidad de los modelos basados en sistemas de ecuaciones diferenciales que contienen múltiples escalas de tiempo (algunas componentes de la solución evolucionan más rápidamente que otras) y puede ser determinada mediante el número de condición si el jacobiano tiene sólo autovalores con parte real negativa. La rigidez reduce significativamente el tamaño del paso del integrador numérico para satisfacer requerimientos de estabilidad y no de precisión, por lo que el algoritmo se vuelve ineficiente.

Los modelos dinámicos distribuidos de gasificadores de lecho móvil son balances de masa y energía que incorporan en sus términos fuente procesos con un rango amplio de escalas de tiempo/espacio, lo cual se manifiesta en un alto grado de rigidez en el modelo, como es reconocido en Amundson y Arri (1978), Caram y Fuentes (1982). Es por ello que la aplicación de un algoritmo numérico de discretización espacial a esta clase de sistemas dinámicos debe tomar en cuenta el efecto de tal rigidez y su relación con las aproximaciones involucradas en cada fase del esquema de modelado incluida su simulación numérica computacional.

5.3.3. Fuentes de error del esquema de modelado de orden reducido.

Es importante resaltar que el desempeño y precisión de todos los esquemas de discretización espacial está sujeto a limitaciones intrínsecas del proceso de modelado y de análisis numérico caracterizadas por tres tipos de errores sistemáticos:

1. **Error de modelado.** Es la desviación de la solución exacta del modelo distribuido del comportamiento real del sistema de procesos debido a las hipótesis simplificadoras planteadas para obtener dicho modelo de transporte. Las ecuaciones de Navier-Stokes

representan con precisión suficiente el comportamiento de los sistemas con flujo laminar por lo que estos errores son despreciables. En cambio, la incertidumbre de modelado para sistemas con flujos turbulentos, lechos empacados, dos fases termodinámicos, combustión, etc., puede producir errores tan grandes que puede llevar a obtener una solución del modelo en EDPs que no sea físicamente realizable incluso cualitativamente. Debido a que no es posible determinar a priori la magnitud de estos errores, se estima su efecto comparando las soluciones ya sea con las descripciones de modelos más detallados y exactos o con soluciones aproximadas obtenidas al aproximar el modelo continuo con métodos numéricos que inducen errores de discretización e iterativos despreciables.

2. **Error de discretización.** Es la diferencia entre la solución exacta del modelo en EDPs y la solución aproximada provista por el modelo discretizado correspondiente. Aunque la cantidad de error inducido varía con el tipo de método de discretización espacial utilizado, las soluciones aproximadas provistas por todos los métodos numéricos convergentes son iguales cuando el número de elementos discretos espaciales N es grande. El orden del método numérico provee una medida del error inducido en relación a la velocidad de convergencia del método, es decir, sólo da la velocidad a la que decrece el error conforme se aumenta N o se reduce el tamaño de los elementos discretos pero no provee una estimación del error de discretización para una malla espacial determinada. Es por ello que es posible que dos métodos con el mismo orden y la misma malla produzcan errores que difieran hasta en un orden de magnitud.
3. **Error del método iterativo.** Está definido como la diferencia entre la solución del modelo discretizado y la solución aproximada computacional. La fuente principal de este error es el conjunto de aproximaciones que introduce el método numérico iterativo de solución al sistema de ecuaciones algebraicas resultante de la discretización completa del modelo distribuido, es decir, al discretizar en el tiempo y en la coordenada espacial axial. Un componente importante de esta clase de errores es el error de redondeo o condición generado por la aritmética de precisión finita del sistema computacional empleado para su simulación. El error de redondeo puede incrementarse si el número de condición del sistema de ecuaciones algebraico resultante de la discretización del modelo es grande. Un hecho bien conocido en la literatura de análisis numérico (Gill *et al.* (1981), Aiken (1985)) es que al aumentar el orden del método de diferencias finitas y/o el número de nodos N se agrega sensibilidad al modelo y por lo tanto rigidez numérica.

Por lo tanto, el error de discretización domina si el número de nodos y/o el orden del método es relativamente bajo, mientras que el error de redondeo y de condición son mucho mayores que el de truncamiento en una malla uniforme de alta densidad (N grande) y/o un método de alto orden.

Resulta fundamental enfatizar la necesidad de identificar estos errores y determinar su importancia relativa en el análisis del comportamiento, así como, en el diseño de esquemas de

control y monitoreo de sistemas de procesos como los gasificadores de lecho empacado basados en modelos de primeros principios (2.2). Resulta lícito considerar que, dada la diversidad de errores que coexisten en el análisis y simulación del modelo, su efecto combinado puede ser acumulado resultando en comportamientos cualitativamente erróneos desde el punto de vista físico, o inclusive, sus contribuciones individuales pueden ser de signo contrario y anularse mutuamente, de forma que la solución de un modelo con un número reducido de elementos discretos N describa con mayor precisión los datos experimentales que un modelo de N mucho mayor (Ferziger y Peric, 2002).

El método de diseño de modelo propuesto en esta tesis no sólo asume la existencia de errores de modelado y de discretización en el sistema de PDEs (2.4) sino que su surgimiento mismo está motivado por las limitaciones impuestas por dichos errores y la necesidad de desarrollar modelos de orden reducido que capturen, con precisión requerida y bajo costo computacional, la dinámica esencial del proceso de gasificación en reactores de lecho móvil.

En consecuencia, se deben tomar en cuenta las siguientes consideraciones al diseñar el número de nodos o elementos discretos N del modelo en parámetros concentrados de gasificadores de lecho empacado:

1. Si se aumenta N y/o reduce el volumen de algunos elementos discretos en una malla no uniforme más allá de un cierto valor entonces se induce un nivel significativo de rigidez numérica al modelo de forma que su simulación numérica puede amplificar considerablemente los errores de redondeo y producir resultados inconsistentes o engañosos.
2. Si N es muy pequeño el error de truncamiento o discretización puede explicar las diferencias significativas entre las predicciones del modelo de N tanques y el modelo espacialmente distribuido.

5.4. Modelo de tren de N RCTAs con retromezclado de un gasificador.

En esta sección se aborda el problema de obtener un modelo en parámetros concentrados a partir del modelo completo en parámetros distribuidos de gasificadores de lecho móvil empacado dado por el conjunto de ecuaciones (2.4). El método de modelado adoptado consiste en la representación del modelo de un reactor tubular de dos fases con convección y dispersión como un tren de N RCTAs (TRCTA) con interacciones de dos vías (hacia adelante y hacia atrás, o en dirección del flujo del sólido y en contracorriente); específicamente, la interconexión hacia atrás toma en cuenta los efectos de retromezclado del calor y la masa en el reactor causados por la dispersión (figura 6.1).

Los conceptos básicos de los métodos numéricos de discretización espacial y el modelo de RCTAs en cascada con retromezclado (MTCR) son integrados para aproximar el comportamiento del sistema distribuido de procesos de gasificación (2.4) mediante un modelo de dimensión finita. Dicho modelo es obtenido de acuerdo a un procedimiento de dos pasos:

(i) semidiscretización espacial del modelo distribuido y (ii) reformulación de las ecuaciones discretizadas en términos de un tren de N RCTAs con retromezclado.

5.4.1. Semidiscretización espacial del gasificador de lecho empacado.

Esta subsección se dedica a deducir un modelo de dimensión finita del reactor de gasificación de lecho empacado mediante la aplicación de un método de discretización espacial al modelo distribuido del proceso (2.4) y su geometría asociada (figura 5.2).

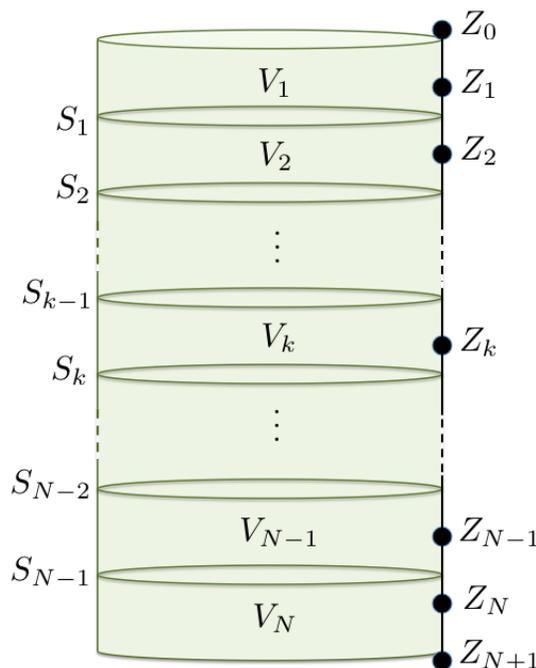


Figura 5.2: Reactor tubular discretizado en N volúmenes V_k separados por superficies S_{k-1} y S_k .

El objetivo de esta subsección consiste en obtener la representación en parámetros concentrados más simple posible del modelo de dimensión infinita del gasificador de lecho empacado (2.4), tal que la naturaleza distribuida del reactor sea retenida con un conjunto mínimo de ODEs y con el acoplamiento más débil (mínima interacción). En consecuencia, la discretización espacial del reactor debe realizarse utilizando cualquier método numérico capaz de preservar el mecanismo de transporte convectivo-dispersivo con interacción a vecinos inmediatos, es decir, las dinámicas de las variables (temperaturas y concentraciones) en el k -ésimo nodo de la malla espacial deben depender solamente de las variables de nodos vecinos ($k+1$ y $k-1$) y de sí mismas. Entre los métodos numéricos extensamente utilizados que generan modelos discretos con dicha estructura subyacente se encuentran los métodos de diferencias finitas y de volumen finito de primer orden: diferencias centradas, *upwind* e híbrido (Patankar, 1980), entre otros.

El punto de partida de los esquemas de discretización espacial consiste en la partición axial de la geometría tubular del reactor de gasificación con volumen V_R de acuerdo a la figura 5.2. Se muestra la malla espacial axial con $N + 2$ nodos con ubicaciones en Z_k , así como, los N volúmenes (subcilindros) discretos V_k definidos por las ubicaciones axiales S_{k-1} y S_k de las superficies de frontera A_{k-1} y A_k , respectivamente.

De forma general, dada una malla espacial con una distribución de ubicaciones de nodos Z_k es posible asignar un conjunto de ubicaciones axiales S_k para las superficies de frontera A_k y por lo tanto, seleccionar el tamaño de los volúmenes V_k que corresponden a dicha malla espacial:

$$V_R = L A_R, \quad V_k = h_k (Z_{k-1}, Z_k, Z_{k+1}) A_R, \quad (5.2)$$

$$h_k = S_k (Z_k, Z_{k+1}) - S_{k-1} (Z_{k-1}, Z_k) = \Delta S_k \quad (5.3)$$

donde V_R es el volumen del reactor tubular, A_R es el área circular de la sección transversal del reactor tubular, V_k es el volumen del k -ésimo subcilindro y h_k es la altura del k -ésimo subcilindro en términos de las ubicaciones de los nodos vecinos. La definición de dicha altura h_k en función de las coordenadas axiales S_k y S_{k-1} de las fronteras del volumen se presenta en la ecuación (5.3).

Esto se sigue del hecho de que el reactor sólo se discretiza axialmente, por lo que $A_k = A_R$ para $k = 0, 1, 2, \dots, N$.

En el caso de una malla espacial uniforme se cumple que:

$$V_k = \frac{V_R}{N} = \left(\frac{L}{N} \right) A_R \Rightarrow \Delta Z_k = \frac{L}{N}, \quad h_k = Z_k - Z_{k-1} = \Delta Z_k$$

Como primera aproximación y por simplicidad el método de discretización espacial adoptado en esta tesis es el de diferencias finitas ad hoc de primer orden basado en la formulación de serie de Taylor. A continuación se reescribe el modelo generalizado de transporte (2.2) sin el subíndice de fase π con el propósito de ilustrar con simplicidad el método de discretización utilizado:

$$\underbrace{\partial_t \varphi}_{\text{Almacenamiento}} = \underbrace{-(\partial_Z \cdot \mathbf{u} \varphi)}_{\text{Convección}} + \underbrace{(\partial_Z \cdot \mathcal{D} \partial_Z \varphi)}_{\text{Dispersión}} + \underbrace{S(\varphi, \mathbf{r})}_{\text{Generación}} \quad (5.4)$$

- *El término de transporte convectivo del operador de transporte (tabla 2.1).* La derivada espacial del transporte convectivo es discretizada mediante el método *upwind-downwind* de primer orden, el cual es una combinación de los esquemas de diferencias finitas hacia atrás y hacia adelante de primer orden:

$$\left(\partial_Z \cdot \mathbf{u} \varphi \right)_k = \max(\text{sgn}[\mathbf{u}_k], 0) \cdot \left(\frac{\mathbf{u}_k \varphi_k - \mathbf{u}_{k-1} \varphi_{k-1}}{Z_k - Z_{k-1}} \right) + \min(\text{sgn}[\mathbf{u}_k], 0) \cdot \left(\frac{\mathbf{u}_{k+1} \varphi_{k+1} - \mathbf{u}_k \varphi_k}{Z_{k+1} - Z_k} \right)$$

Esta implementación en diferencias finitas ajusta la dirección de transporte convectivo de acuerdo al signo del coeficiente de transporte convectivo (velocidad de flujo u). Por lo tanto, para el caso de un reactor de gasificación de flujos paralelos descendentes el término de diferencias finitas hacia atrás es el que prevalece:

$$\left(\partial_Z \cdot u\varphi\right)_k = \left(\frac{u_k\varphi_k - u_{k-1}\varphi_{k-1}}{Z_k - Z_{k-1}}\right) \quad (5.5)$$

mientras que para un gasificador de flujos en contracorriente el término convectivo de las ecuaciones de balance de masa y energía de la fase gas es discretizado con diferencias finitas hacia adelante debido al signo negativo de u :

$$\left(\partial_Z \cdot u\varphi\right)_k = \left(\frac{u_{k+1}\varphi_{k+1} - u_k\varphi_k}{Z_{k+1} - Z_k}\right) \quad (5.6)$$

- *El término de transporte dispersivo del operador de transporte (tabla 2.1).* Un método de diferencias finitas centradas es empleado para el término diferencial espacial dispersivo: diferencias finitas hacia atrás en la derivada espacial exterior y diferencias finitas hacia adelante en la derivada interior.

$$\begin{aligned} \partial_Z \left(\mathcal{D}\partial_Z\varphi\right)_k &= \frac{\mathcal{D}_k(\partial_Z\varphi)_k - \mathcal{D}_{k-1}(\partial_Z\varphi)_{k-1}}{Z_k - Z_{k-1}}, \\ \left(\partial_Z\varphi\right)_k &= \left(\frac{\varphi_{k+1} - \varphi_k}{Z_{k+1} - Z_k}\right), \\ \left(\partial_Z\varphi\right)_{k-1} &= \left(\frac{\varphi_k - \varphi_{k-1}}{Z_k - Z_{k-1}}\right) \end{aligned}$$

- *El operador de frontera en $Z = 0$.* Se emplea el método de diferencias finitas hacia adelante en la derivada espacial.
- *El operador de frontera en $Z = L$.* Se emplea el método de diferencias finitas hacia atrás en la derivada espacial.

Las ecuaciones del modelo distribuido (2.4a)-(2.4d) son discretizadas espacialmente generando un conjunto de EDOs, las cuales modelan la evolución temporal de las variables de concentración y temperatura del gasificador a lo largo de las distintas ubicaciones axiales dadas por los nodos internos de la malla espacial axial $k = 1, 2, \dots, N$:

$$\dot{\mathbf{C}}_{s,k} = \Gamma_{MC,k}^s(\mathbf{C}_{s,k-1}, \mathbf{C}_{s,k}) + \mathcal{G}_{s,k} \quad (5.7a)$$

$$C_{s,k}C_{p,k}^s\dot{T}_{s,k} = \Gamma_{HC,k}^s(T_{s,k-1}, T_{s,k}) + \Gamma_{HD,k}^s(T_{s,k-1}, T_{s,k}, T_{s,k+1}) + Q_k^s \quad (5.7b)$$

$$\dot{\mathbf{C}}_{g,k} = \Gamma_{MC,k}^g(\mathbf{C}_{g,k-1}, \mathbf{C}_{g,k}) + \Gamma_{MD,k}^g(\mathbf{C}_{g,k-1}, \mathbf{C}_{g,k}, \mathbf{C}_{g,k+1}) + \mathcal{G}_{g,k} \quad (5.7c)$$

$$C_{g,k}C_{p,k}^g\dot{T}_{g,k} = \Gamma_{HC,k}^g(T_{g,k-1}, T_{g,k}) + \Gamma_{HD,k}^g(T_{g,k-1}, T_{g,k}, T_{g,k+1}) + Q_k^g \quad (5.7d)$$

con las condiciones iniciales de los estados del sistema dinámico en parámetros concentrados:

$$\begin{aligned} t' = 0 : \quad \mathbf{C}_s(Z_k, 0) &= \mathbf{C}_{s,k}(0) = \mathbf{C}_{sic}(Z_k), \quad T_s(Z_k, 0) = T_{s,k}(0) = T_{sic}(Z_k), \\ \mathbf{C}_g(Z_k, 0) &= \mathbf{C}_{g,k}(0) = \mathbf{C}_{gic}(Z_k), \quad T_g(Z_k, 0) = T_{g,k}(0) = T_{gic}(Z_k) \end{aligned} \quad (5.7e)$$

los operadores de transporte en diferencias para el k -ésimo nodo interior son:

$$\Gamma_{MC,k}^s = \left(\frac{\mathbf{u}_{s,k-1}}{\Delta Z_k} \right) \mathbf{C}_{s,k-1} - \left(\frac{\mathbf{u}_{s,k}}{\Delta Z_k} \right) \mathbf{C}_{s,k}, \quad \Delta Z_k = Z_k - Z_{k-1} \quad (5.7f)$$

$$\Gamma_{MC,k}^g = \left(\frac{\mathbf{u}_{g,k-1}}{\Delta Z_k} \right) \mathbf{C}_{g,k-1} - \left(\frac{\mathbf{u}_{g,k}}{\Delta Z_k} \right) \mathbf{C}_{g,k} \quad (5.7g)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{MD,k}^g &= \left(\frac{\mathcal{D}_{M,k}}{\Delta Z_k \Delta Z_{k+1}} \right) \mathbf{C}_{g,k+1} - \left(\frac{\mathcal{D}_{M,k}}{\Delta Z_k \Delta Z_{k+1}} \right) \mathbf{C}_{g,k} \\ &+ \left(\frac{\mathcal{D}_{M,k-1}}{\Delta Z_k^2} \right) \mathbf{C}_{g,k-1} - \left(\frac{\mathcal{D}_{M,k-1}}{\Delta Z_k^2} \right) \mathbf{C}_{g,k} \end{aligned} \quad (5.7h)$$

$$\Gamma_{HC,k}^\pi = \left(\frac{C_{\pi,k-1} C_{p,k-1}^\pi \mathbf{u}_{\pi,k-1}}{\Delta Z_k} \right) T_{\pi,k-1} - \left(\frac{C_{\pi,k-1} C_{p,k-1}^\pi \mathbf{u}_{\pi,k-1}}{\Delta Z_k} \right) T_{\pi,k} \quad (5.7i)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{HD,k}^\pi &= \left(\frac{C_{\pi,k} C_{p,k}^\pi \mathcal{D}_{H,k}^\pi}{\Delta Z_k \Delta Z_{k+1}} \right) T_{\pi,k+1} - \left(\frac{C_{\pi,k} C_{p,k}^\pi \mathcal{D}_{H,k}^\pi}{\Delta Z_k \Delta Z_{k+1}} \right) T_{\pi,k} \\ &+ \left(\frac{C_{\pi,k-1} C_{p,k-1}^\pi \mathcal{D}_{H,k-1}^\pi}{\Delta Z_k^2} \right) T_{\pi,k-1} - \left(\frac{C_{\pi,k-1} C_{p,k-1}^\pi \mathcal{D}_{H,k-1}^\pi}{\Delta Z_k^2} \right) T_{\pi,k} \end{aligned} \quad (5.7j)$$

y los términos fuente discretizados han sido agrupados en la siguiente forma compacta:

$$\mathcal{G}_{\pi,k} = \mathbf{S}_\pi^T \mathbf{R}(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) \quad (5.7k)$$

$$\begin{aligned} Q_k^g &= - \sum_{j=1}^{NRg} \Delta H_j \mathcal{R}_j(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) + \mathcal{A}_{sg} h_{sg}(\mathbf{T}_k) [T_{s,k} - T_{g,k}] \\ &- \mathcal{A}_v h_{gw}(\mathbf{T}_k) [T_{g,k} - T_{w,k}] \end{aligned} \quad (5.7l)$$

$$\begin{aligned} Q_k^s &= - \sum_{j=1}^{NRs} \Delta H_j \mathcal{R}_j(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) - \mathcal{A}_{sg} h_{sg}(\mathbf{T}_k) [T_{s,k} - T_{g,k}] \\ &- \mathcal{A}_v h_{sw}(\mathbf{T}_k) [T_{s,k} - T_{w,k}] \end{aligned} \quad (5.7m)$$

En el nodo frontera $k = 0$ donde ingresan los reactantes ($Z_0 = 0$) la condición de frontera (2.4e) es discretizada formando los balances estáticos que gobiernan el comportamiento de

las variables en dicho nodo:

$$\mathbf{C}_{s,0} = \mathbf{C}_{se} \quad (5.7n)$$

$$\left(\frac{\mathcal{D}_{M,0}}{\Delta Z_1} \right) [\mathbf{C}_{g,1} - \mathbf{C}_{g,0}] = u_{g,0} [\mathbf{C}_{g,0} - \mathbf{C}_{ge}] \quad (5.7ñ)$$

$$\left(\frac{\mathcal{D}_{H,0}^\pi}{\Delta Z_1} \right) [T_{\pi,1} - T_{\pi,0}] = u_{\pi,0} [T_{\pi,0} - T_{\pi e}], \quad \pi = s, g \quad (5.7o)$$

mientras que en el nodo frontera $k = N+1$ donde pasan los efluentes del proceso ($Z_{N+1} = L$), se discretizan las condiciones de frontera (2.4f) resultando en los balances estáticos:

$$\mathbf{C}_{s,N+1} = \mathbf{C}_{s,N}, \quad \mathbf{C}_{g,N+1} = \mathbf{C}_{g,N}, \quad T_{s,N+1} = T_{s,N}, \quad T_{g,N+1} = T_{g,N} \quad (5.7p)$$

donde el subíndice k indica el valor de la variable en la posición axial espacial Z_k correspondiente al k -ésimo nodo del reactor discretizado, por ejemplo: $\mathbf{C}_{k-1} = \mathbf{C}(Z_k, t')$ (o $\mathbf{T}_{k-1} = \mathbf{T}(Z_k, t')$) denota el vector de concentraciones (o temperaturas) de las componentes sólidas y gaseosas en la ubicación espacial axial Z_k del nodo k -ésimo, mientras que $\dot{\mathbf{C}}_{\pi,k}$ (o \dot{T}_π) es la derivada temporal del vector de concentraciones (o de la temperatura) de la fase π en el nodo k -ésimo: $\frac{d\mathbf{C}_{\pi,k}}{dt'}$ (o $\frac{dT_{\pi,k}}{dt'}$). Si el método de discretización utilizado es volumen finito o elemento finito, entonces éste denota la derivada temporal del promedio de la variable en el volumen o elemento finito k -ésimo.

Las variables de transporte convectivo y dispersivo son definidas en las ubicaciones axiales dictadas por los nodos de la malla espacial:

$$u_{\pi,k} = u_\pi(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k), \quad \mathcal{D}_{M,k} = \mathcal{D}_M(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k), \quad \mathcal{D}_{H,k}^\pi = \mathcal{D}_H^\pi(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k), \quad \pi = s, g$$

Las velocidades de flujo convectivo para ambas fases $u_{g,k}$, $u_{s,k}$ en los nodos interiores de la malla son obtenidas a partir de las ecuaciones de continuidad del gas (2.8) y del sólido (2.7) discretizadas en $k = 1, 2, \dots, N$:

$$\dot{C}_{g,k} = \left(\frac{u_{g,k-1}}{\Delta Z_k} \right) C_{g,k-1} - \left(\frac{u_{g,k}}{\Delta Z_k} \right) C_{g,k} + \alpha_g \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n_g} s_{i,j}^g \mathcal{R}_j(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) \quad (5.8a)$$

$$\dot{C}_{s,k} = \left(\frac{u_{s,k-1}}{\Delta Z_k} \right) C_{s,k-1} - \left(\frac{u_{s,k}}{\Delta Z_k} \right) C_{s,k} + \alpha_s \sum_{j=1}^{NRs} \sum_{i=1}^{n_s} s_{i,j}^s \mathcal{R}_j(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) \quad (5.8b)$$

con las condiciones de frontera (2.9) discretizadas:

$$C_{g,0} u_{g,0} = C_{ge} u_{ge}, \quad C_{s,0} u_{s,0} = C_{se} u_{se}$$

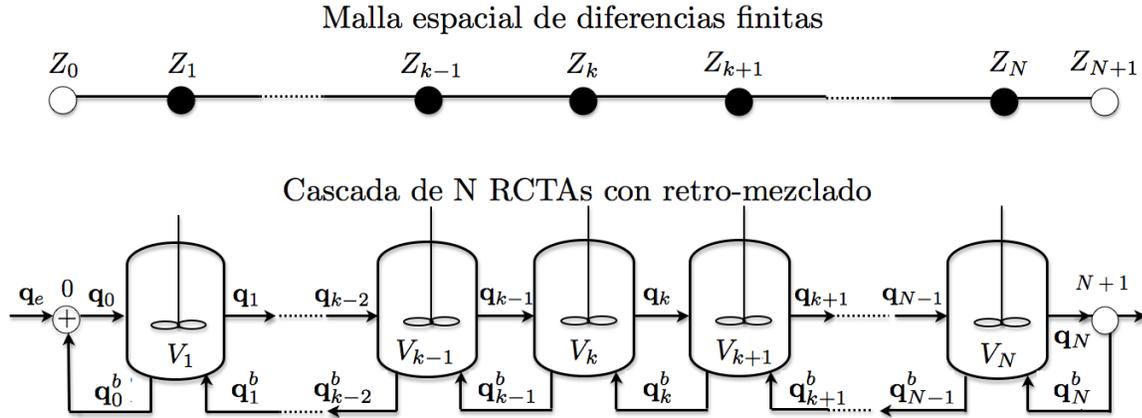


Figura 5.3: Malla de discretización espacial del reactor tubular y el tren de N RCTAs con flujos de retro-mezclado.

5.4.2. Analogía entre un TRCTA y un reactor de gasificación.

El método de modelado en dimensión finita de esta tesis relaciona aspectos fundamentales de los fenómenos de transporte del reactor de gasificación de lecho empacado modelados en el sistema distribuido (2.4) con el modelo en parámetros concentrados (5.7). Dicha relación se establece mediante una analogía entre el modelo semidiscretizado espacialmente de $N + 2$ nodos (5.7) y el modelo de un tren de N RCTAs con retromezclado y 2 sistemas estáticos en los extremos del tren, la cual surge de forma natural al seguir un procedimiento de interpretación con énfasis en los fenómenos de transporte modelados:

1. Se establece que el conjunto de EDOs (5.7a)-(5.7d) planteadas en cada nodo interno de la malla espacial ($k = 1, 2, \dots, N$) pueden ser interpretadas como los balances de masa y energía de un RCTA no isotérmico multicomponente de dos fases termodinámicas (ver Apéndice C), al comparar las ecuaciones (5.7a)-(5.7d) con las del modelo del RCTA (C.1) en el Apéndice C. Así mismo se encuentra una relación entre los flujos entrantes y de salida del RCTA con los términos correspondientes de los operadores de transporte en diferencias discretos.
2. Se explota la propiedad de conservación de las ecuaciones discretizadas (5.7a)-(5.7d) y se comparan los distintos flujos de sus operadores de transporte en diferencias (5.7f)-(5.7j) en las ecuaciones de balance de los nodos o RCTAs $k - 1, k, k + 1$. Con base en ello, se deducen las interacciones entre el nodo interior k -ésimo de la malla espacial con sus dos nodos vecinos: $k - 1$ y $k + 1$ mediante los flujos de transporte convectivos \mathbf{q}_k^C y dispersivos \mathbf{q}_k^D que tienen en común los balances de masa y energía del nodo k -ésimo con los balances correspondientes de los elementos $k - 1$ y $k + 1$. Posteriormente las ecuaciones de balance son reescritas en términos de flujos volumétricos hacia adelante \mathbf{q}_k (descendentes) y de retromezclado \mathbf{q}_k^b (ascendentes) de la interconexión de dos vías del TRCTA. Es importante enfatizar que la identificación de dichos flujos depende de

que la comparación de flujos en nodos vecinos se realice en las ecuaciones de conservación discretizadas, por lo que este paso se debe llevar a cabo en las ecuaciones de balance de entalpía de cada fase discretizadas en su forma conservativa y no en las ecuaciones de temperatura (2.4b), (2.4d) derivadas a partir de ella Badillo-Hernández (2009).

3. Las condiciones de frontera discretizadas (ecuaciones algebraicas no lineales) en los nodos $k = 0$ (5.7n)-(5.7o) y $k = N + 1$ (5.7p) son sustituidas en las ecuaciones discretizadas en los nodos $k = 1$ y $k = N$ respectivamente. Esto tiene el objetivo de incluir el efecto de los flujos, concentraciones y temperaturas de alimentación $(\mathbf{q}_e, \mathbf{C}_{se}, \mathbf{C}_{ge}, T_{se}, T_{ge})$ en los balances de masa y energía del primer nodo interno ($k = 1$), y a su vez eliminar su dependencia de las variables del nodo $k = 0$ $(\mathbf{C}_0, \mathbf{T}_0)$, así como, desacoplar la dinámica de las variables del nodo $k = N$ de las variables del nodo $k = N + 1$ $(\mathbf{C}_{N+1}, \mathbf{T}_{N+1})$.
4. Las condiciones de frontera discretizadas en los nodos $k = 0$ y $k = N + 1$ (5.7n)-(5.7p) son reformuladas en términos de flujos volumétricos de entrada y salida del reactor para representar la interacción del sistema con el exterior a través de las variables en los nodos frontera o exteriores $k = 0$ y $k = N + 1$ de la malla espacial.

En consecuencia, el reactor de gasificación de lecho móvil es modelado en dimensión finita por la siguiente representación en espacio de estados de un tren de N RCTAs con retromezclado:

Primer RCTA ($k = 1$)

$$V_1 \dot{\mathbf{C}}_{s,1} = q_e^{Ms} \mathbf{C}_{se} - q_1^{Ms} \mathbf{C}_{s,1} + \mathcal{G}_s(\mathbf{C}_1, \mathbf{T}_1) V_1 \quad (5.9a)$$

$$V_1 \dot{T}_{s,1} = \left(\frac{C_{s,0} C_{p,0}^s}{C_{s,1} C_{p,1}^s} \right) (q_e^{Hs} T_{se} - q_{out,1}^{Hs} T_{s,1}) + q_1^{b,Hs} T_{s,2} + \frac{Q^s(\mathbf{C}_1, \mathbf{T}_1) V_1}{C_{s,1} C_{p,1}^s} \quad (5.9b)$$

$$V_1 \dot{\mathbf{C}}_{g,1} = q_e^{Mg} \mathbf{C}_{ge} - q_1^{Mg} \mathbf{C}_{g,1} + q_1^{b,Mg} \mathbf{C}_{g,2} + \mathcal{G}_g(\mathbf{C}_1, \mathbf{T}_1) V_1 \quad (5.9c)$$

$$V_1 \dot{T}_{g,1} = \left(\frac{C_{g,0} C_{p,0}^g}{C_{g,1} C_{p,1}^g} \right) (q_e^{Hg} T_{ge} - q_{out,1}^{Hg} T_{g,1}) + q_1^{b,Hg} T_{g,2} + \frac{Q^g(\mathbf{C}_1, \mathbf{T}_1) V_1}{C_{g,1} C_{p,1}^g} \quad (5.9d)$$

RCTAs interiores ($2 \leq k \leq N - 1$)

$$V_k \dot{\mathbf{C}}_{s,k} = q_{k-1}^{Ms} \mathbf{C}_{s,k-1} - q_k^{Ms} \mathbf{C}_{s,k} + \mathbf{g}_s(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) V_k \quad (5.9e)$$

$$V_k \dot{T}_{s,k} = \left(\frac{C_{s,k-1} C_{p,k-1}^s}{C_{s,k} C_{p,k}^s} \right) (q_{k-1}^{Hs} T_{s,k-1} - q_{out,k}^{Hs} T_{s,k}) + q_k^{b,Hs} T_{s,k+1} \quad (5.9f)$$

$$- \left(\frac{C_{s,k-1} C_{p,k-1}^s}{C_{s,k} C_{p,k}^s} \right) q_{k-1}^{b,Hs} T_{s,k} + \frac{Q^s(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) V_k}{C_{s,k} C_{p,k}^s} \quad (5.9g)$$

$$V_k \dot{\mathbf{C}}_{g,k} = q_{k-1}^{Mg} \mathbf{C}_{g,k-1} - q_k^{Mg} \mathbf{C}_{g,k} + q_k^{b,Mg} \mathbf{C}_{g,k+1} - q_{k-1}^{b,Mg} \mathbf{C}_{g,k} + \mathbf{g}_g(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) V_k \quad (5.9h)$$

$$V_k \dot{T}_{g,k} = \left(\frac{C_{g,k-1} C_{p,k-1}^g}{C_{g,k} C_{p,k}^g} \right) (q_{k-1}^{Hg} T_{g,k-1} - q_{out,k}^{Hg} T_{g,k}) + q_k^{b,Hg} T_{g,k+1} \quad (5.9i)$$

$$- \left(\frac{C_{g,k-1} C_{p,k-1}^g}{C_{g,k} C_{p,k}^g} \right) q_{k-1}^{b,Hg} T_{g,k} + \frac{Q^g(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) V_k}{C_{g,k} C_{p,k}^g} \quad (5.9j)$$

Último RCTA ($k = N$)

$$V_N \dot{\mathbf{C}}_{s,N} = q_{N-1}^{Ms} \mathbf{C}_{s,N-1} - q_N^{Ms} \mathbf{C}_{s,N} + \mathbf{g}_s(\mathbf{C}_N, \mathbf{T}_N) V_N \quad (5.9k)$$

$$V_N \dot{T}_{s,N} = \left(\frac{C_{s,N-1} C_{p,N-1}^s}{C_{s,N} C_{p,N}^s} \right) q_{N-1}^{Hs} (T_{s,N-1} - T_{s,N}) + \frac{Q^s(\mathbf{C}_N, \mathbf{T}_N) V_N}{C_{s,N} C_{p,N}^s} \quad (5.9l)$$

$$V_N \dot{\mathbf{C}}_{g,N} = q_{N-1}^{Mg} \mathbf{C}_{g,N-1} - (q_N^{Mg} - q_N^{b,Mg}) \mathbf{C}_{g,N} - q_{N-1}^{b,Mg} \mathbf{C}_{g,N} + \mathbf{g}_g(\mathbf{C}_N, \mathbf{T}_N) V_N \quad (5.9m)$$

$$V_N \dot{T}_{g,N} = \left(\frac{C_{g,N-1} C_{p,N-1}^g}{C_{g,N} C_{p,N}^g} \right) q_{N-1}^{Hg} (T_{g,N-1} - T_{g,N}) + \frac{Q^g(\mathbf{C}_N, \mathbf{T}_N) V_N}{C_{s,N} C_{p,N}^g} \quad (5.9n)$$

donde

$$q_{out,k}^{H\pi} = (q_{k-1}^{H\pi} - q_{k-1}^{b,H\pi}) + \left(\frac{C_{\pi,k} C_{p,k}^\pi}{C_{\pi,k-1} C_{p,k-1}^\pi} \right) q_k^{b,H\pi}, \quad \pi = s, g \quad (5.9\tilde{n})$$

$$\mathbf{q}_e = \begin{bmatrix} q_e^{Ms} \\ q_e^{Hs} \\ q_e^{Mg} \\ q_e^{Hg} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q}_k = \begin{bmatrix} q_k^{Ms} \\ q_k^{Hs} \\ q_k^{Mg} \\ q_k^{Hg} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q}_k^b = \begin{bmatrix} q_k^{b,Mg} \\ q_k^{b,Hs} \\ q_k^{b,Mg} \\ q_k^{b,Hg} \end{bmatrix} \quad (5.9o)$$

$$V_R = LA_R, \quad V_k = \Delta Z_k A_k, \quad A_k = A_R, \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (5.9p)$$

V_k (o V_R) es el volumen del k -ésimo tanque (o del reactor tubular), ΔZ_k es la distancia axial entre el k -ésimo nodo y $(k - 1)$ -ésimo nodo de la malla de discretización espacial, A_R es el área circular de la sección transversal del reactor tubular, mientras que los parámetros \mathbf{q} representan los flujos volumétricos de entrada y de salida de cada tanque en la siguiente

forma:

1. \mathbf{q}_e es el vector de flujos volumétricos de entrada del reactor tubular cuyos elementos son los flujos de masa q_e^{Ms} y calor q_e^{Hs} del sólido (o de masa q_e^{Mg} y de calor q_e^{Hg} de la fase gas).
2. \mathbf{q}_k es el vector de flujos hacia adelante (o de retro-mezclado \mathbf{q}_k^b) del tanque k -ésimo. \mathbf{q}_k (o \mathbf{q}_k^b) contiene los flujos hacia adelante (o de retro-mezclado) de masa q_k^{Ms} (o $q_k^{b,Ms}$) y calor q_k^{Hs} (o $q_k^{b,Hs}$) del sólido, así como de masa q_k^{Mg} (o $q_k^{b,Mg}$) y de calor q_k^{Hg} (o $q_k^{b,Hg}$) de la fase gas del tanque k -ésimo.

Debido a las distintas formas de asignación de los volúmenes V_k dada una distribución de ubicaciones de nodos Z_k , en general para una malla espacial no uniforme se cumple que:

$$\sum_{k=1}^N V_k \leq V_R$$

Las condiciones de frontera en el fondo del reactor ($Z = Z_{N+1} = L$) producen la ecuación de balance algebraica trivial (5.10b), mientras que las condiciones de frontera en la cima del reactor (en $Z = Z_0 = 0$) dan lugar al conjunto de ecuaciones algebraicas (5.10a) que representan mezcladores de flujos de masa y energía.

$$\mathbf{q}_0 \phi_0 = \mathbf{q}_e \phi_e + \mathbf{q}_0^b \phi_1, \quad \text{en } Z = 0 \quad (5.10a)$$

$$\phi_{N+1} = \phi_N, \quad \text{en } Z = L \quad (5.10b)$$

donde

$$\mathbf{q}_e = \begin{bmatrix} q_e^{Ms} \\ q_e^{Hs} \\ q_e^{Mg} \\ q_e^{Hg} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{se} A_e \\ u_{se} A_e \\ u_{ge} A_e \\ u_{ge} A_e \end{bmatrix}, \quad \phi_k = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{s,k} \\ T_{s,k} \\ \mathbf{C}_{g,k} \\ T_{g,k} \end{bmatrix}, \quad A_e = A_R, \quad k = 0, \dots, N+1, e \quad (5.11)$$

u_{ge} (o u_{se}) es la velocidad de flujo de entrada de la fase gas (o sólida), A_e es el área transversal del puerto de los flujos de entrada y ϕ_k es el vector con concentraciones en el k -ésimo tanque o nodo.

De este modo, se puede establecer una analogía directa entre el modelo discretizado espacialmente de un gasificador de lecho empacado (5.7) y un tren de N RCTAs con dos tipos de flujos volumétricos: los flujos hacia adelante (\mathbf{q}_k) y los flujos de retromezclado por dispersión (\mathbf{q}_k^b) representados en la figura 5.3. En consecuencia, las velocidades convectivas (u_s y u_g) y los coeficientes de dispersión (\mathcal{D}_M , \mathcal{D}_H^s y \mathcal{D}_H^g) del reactor tubular de gasificación de flujos concurrentes (2.4) se relacionan con los elementos de los vectores de flujo hacia adelante (\mathbf{q}_k) y de retro-mezclado (\mathbf{q}_k^b) del conjunto de RCTAs de acuerdo al conjunto de

expresiones (5.12)

$$\mathbf{q}_k = \mathbf{q}_k^C + \mathbf{q}_k^D, \quad \mathbf{q}_k^b = \mathbf{q}_k^D \quad (5.12a)$$

$$\mathbf{q}_k^C = \begin{bmatrix} q_k^{C,Ms} \\ q_k^{C,Hs} \\ q_k^{C,Mg} \\ q_k^{C,Hg} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} u_{s,k} A_k \\ u_{s,k} A_k \\ u_{g,k} A_k \\ u_{g,k} A_k \end{bmatrix} \quad (5.12b)$$

$$\mathbf{q}_k^D = \begin{bmatrix} q_k^{D,Ms} \\ q_k^{D,Hs} \\ q_k^{D,Mg} \\ q_k^{D,Hg} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{\mathcal{D}_{H,k}^s A_k}{\Delta Z_{k+1}} \\ \frac{\mathcal{D}_{M,k} A_k}{\Delta Z_{k+1}} \\ \frac{\mathcal{D}_{H,k}^g A_k}{\Delta Z_{k+1}} \end{bmatrix} \quad (5.12c)$$

Mientras que el presente estudio se enfoca en el reactor de flujos concurrentes, el método de modelado desarrollado es aplicable a gasificadores de flujos en contracorriente ya que al utilizar la parte de downwind (5.6) del método de discretización para el operador convectivo de las ecuaciones de conservación para el gas, los flujos del modelo de N-RCTAs (5.9) se relacionan con los coeficientes de transporte convectivo y dispersivo del modelo distribuido de acuerdo a las siguientes expresiones:

$$\mathbf{q}_k = \begin{bmatrix} q_k^{Ms} \\ q_k^{Hs} \\ q_k^{Mg} \\ q_k^{Hg} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} u_{s,k} A_k \\ u_{s,k} A_k + \frac{\mathcal{D}_{H,k}^s A_k}{\Delta Z_{k+1}} \\ \frac{\mathcal{D}_{M,k} A_k}{\Delta Z_{k+1}} \\ \frac{\mathcal{D}_{H,k}^g A_k}{\Delta Z_{k+1}} \end{bmatrix} \quad (5.13a)$$

$$\mathbf{q}_k^b = \begin{bmatrix} q_k^{b,Ms} \\ q_k^{b,Hs} \\ q_k^{b,Mg} \\ q_k^{b,Hg} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{\mathcal{D}_{H,k}^s A_k}{\Delta Z_{k+1}} \\ u_{g,k} A_k + \frac{\mathcal{D}_{M,k} A_k}{\Delta Z_{k+1}} \\ u_{g,k} A_k + \frac{\mathcal{D}_{H,k}^g A_k}{\Delta Z_{k+1}} \end{bmatrix} \quad (5.13b)$$

De acuerdo a estas expresiones (5.13), un gasificador de flujos en contracorriente posee un mecanismo natural intrínseco de retro-mezclado de calor y masa de intensidad similar a la del flujo principal descendente (hacia adelante), incluso si los coeficientes de dispersión de masa y de calor son cero (o los números de Peclet correspondientes son infinitos) en el modelo distribuido. En este sentido, el modelo de N-RCTAs provee un mejor entendimiento de los fenómenos de transporte involucrados.

En el caso de estudio, la ecuación de balance molar total del gas discretizada (5.8a) es utilizada para obtener el flujo efluente convectivo $q_k^{C,Mg}, q_k^{C,Hg}$ de la fase gas del k -ésimo RCTA mediante el siguiente procedimiento:

1. Se emplea la ley de gas ideal para relacionar la concentración molar del gas con la temperatura del gas:

$$C_{g,k} = \frac{P_g}{RT_{g,k}}; \quad C_{g,k-1} = \frac{P_g}{RT_{g,k-1}}$$

2. Derivando esta expresión respecto al tiempo se obtiene una relación entre la dinámica o la variación temporal de la concentración total con la dinámica de la temperatura:

$$\frac{dC_{g,k}}{dt'} = -\frac{C_{g,k}}{T_{g,k}} \frac{dT_{g,k}}{dt'}$$

3. Finalmente se sustituye esta expresión en el balance de moles totales del gas (5.8a), obteniendo una expresión para el flujo volumétrico de salida del gas en términos de la dinámica de la temperatura del gas dada por la expresión (5.9i):

$$q_k^{C,Mg} = \left(\frac{C_{g,k-1}}{C_{g,k}} \right) q_{k-1}^{C,Mg} + \left(\frac{1}{C_{g,k}} \right) \alpha_g \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n_g} s_{i,j}^g \mathcal{R}_j(\mathbf{C}_k, \mathbf{T}_k) V_k + \left(\frac{V_k}{T_{g,k}} \right) \dot{T}_{g,k}$$

El modelo en parámetros distribuidos (2.4) de un gasificador de lecho empacado toma en cuenta dos tipos de fenómenos de transporte fundamentales: convectivo y dispersivo. El diagrama de procesos químicos de la figura 6.1 muestra que la esencia del transporte dispersivo y convectivo en un reactor tubular puede ser reproducida con un tren de N RCTAs y un mezclador. Cada RCTA debe tener interconexiones de dos vías mediante flujos volumétricos con sus vecinos. Por ejemplo, el RCTA k -ésimo provee masa y energía a los RCTAs $(k+1)$ -ésimo y $(k-1)$ -ésimo por medio de los flujos \mathbf{q}_k y \mathbf{q}_{k-1}^b , respectivamente; además, el RCTA k -ésimo extrae energía y masa del RCTA $(k+1)$ -ésimo a través del flujo \mathbf{q}_k^b y del RCTA $(k-1)$ -ésimo mediante \mathbf{q}_{k-1} . De acuerdo a la expresión (5.12a), el vector de flujos directos \mathbf{q}_k tiene dos componentes: el vector de flujos convectivos \mathbf{q}_k^C y el vector de flujos dispersivos \mathbf{q}_k^D , mientras que el flujo de retro-mezclado \mathbf{q}_k^b se debe exclusivamente al flujo por transporte dispersivo. Es por ello que si la dispersión es muy baja en relación con el transporte convectivo entonces el tren de RCTAs se reduce a una conexión en serie de RCTAs convencional con una dirección de flujo axial dominante. Cabe señalar que en el diagrama de procesos de la figura (5.3), las flechas representan flujos compuestos (materia y energía de ambas fases) transportados de un tanque a otro a través de una interfaz.

El modelo del tren bidireccional de N -RCTAs (5.9) para el gasificador de flujos concurrentes descendentes es un sistema de procesos por etapas que de forma compacta se puede expresar como:

$$\dot{\mathbf{x}}_1 = \mathbf{f}_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{u}) \quad (5.14)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_k = \mathbf{f}_k(\mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_{k+1}), \quad k = 2, \dots, N-1 \quad (5.15)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_N = \mathbf{f}_N(\mathbf{x}_{N-1}, \mathbf{x}_N) \quad (5.16)$$

donde

$$\mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{s,j} \\ T_{s,j} \\ \mathbf{C}_{g,j} \\ T_{g,j} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_e \\ \mathbf{q}_e \end{bmatrix} \quad j = 1, \dots, N, e \quad (5.17)$$

$\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ son los estados dinámicos y \mathbf{u} es la entrada exógena.

En conclusión, el sistema dinámico resultante posee las siguientes características:

1. Interconexión en cascada de N subsistemas químicos de parámetros concentrados conocidos (RCTAs) con interacción baja.
2. El TRCTA con retro-mezclado (5.9) puede interpretarse como una estructura de modelo que tiene como parámetros principales de diseño al número de RCTAs N , sus volúmenes V_k , sus flujos hacia adelante \mathbf{q}_k y sus retro-flujos \mathbf{q}_k^b (para $k = 1, 2, \dots, N$). Es decir, en función de la precisión requerida por el objetivo de modelado y la incertidumbre típica del sistema específico uno puede sintonizar dichos parámetros de forma independiente a las ecuaciones (5.9p), (5.12), cuya forma específica depende del método numérico de discretización espacial elegido.
3. Proceso de N etapas con interacción a vecinos únicamente. Posee la misma estructura que los modelos de las columnas de destilación.
4. Consiste en $M = N \times (n_s + n_g + 2)$ EDOs correspondientes a las ecuaciones de balance de las temperaturas y concentraciones de las componentes del sólido y gas.
5. Matriz jacobiana con estructura tridiagonal a bloques que retiene las interacciones por transporte convectivo y dispersivo (Badillo-Hernández y Alvarez-Icaza, 2010).
6. Modelo útil para configuración de flujos entrantes en contracorriente y concurrentes. Para modelar un reactor en contracorriente solo se modifica la dirección de los flujos convectivos en las ecuaciones de balance discretizadas para cada tanque de acuerdo al método upwind-downwind de discretización espacial.

Capítulo 6

Método de diseño de modelo propuesto.

En el presente capítulo se aborda el problema de diseño de modelo para reactores tubulares de gasificación de lecho empacado en función del objetivo específico de modelado: diseño de experimentos, equipo, modo de operación, esquemas de monitoreo y control. Se desarrolla una representación en parámetros concentrados de dimensión finita reducida del reactor tubular de gasificación de forma que el objetivo de modelado particular es logrado con el mínimo número de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs), teniendo en cuenta la precisión requerida del modelo y la incertidumbre experimental relativa a los parámetros de cinética y transporte. El procedimiento de diseño de modelo se estructura en tres etapas (Badillo-Hernandez *et al.*, 2013):

1. La separación de las componentes invariantes de reacción basada en consideraciones estequiométricas del capítulo 3. Se realiza un análisis del rango de la matriz de coeficientes estequiométricos de las componentes de la fase gas para determinar el número de reacciones independientes existentes en la red de reacciones del modelo. El resultado de este análisis es la partición del conjunto de ecuaciones de balance de componentes gaseosas: n (siendo n el rango de la matriz estequiométrica) balances de masa con término fuente (dependientes de una cinética de reacción independiente), y $N_g - n$ (siendo N_g el número de componentes gaseosas totales) ecuaciones de balance sin término fuente y cuasi-lineales (independientes de las velocidades de reacción) correspondientes a los invariantes de reacción.
2. La aplicación de la hipótesis de estado cuasi-estacionario en la fase gas y equilibrio térmico entre fases presentada en el capítulo 4. Se desprecia la dinámica o término de almacenamiento de los balances de las componentes químicas gaseosas, debido a la diferencia entre las densidades de la fase sólida y gaseosa. Adicionalmente, se supone que ambas fases tienen la misma temperatura debido a la alta velocidad de transferencia de calor entre fases. El resultado es un modelo cuasi-estacionario en parámetros

distribuidos que establece que la dinámica dominante del reactor es determinada por las especies sólidas y la temperatura.

3. La implementación del esquema de modelado en dimensión finita del capítulo 5. Consiste en la aproximación del modelo cuasi-estacionario y en parámetros distribuidos del reactor mediante un esquema de discretización espacial por medio de diferencias finitas de primer orden seguida de la interpolación de los perfiles espaciales del gasificador mediante polinomios a trozos de segundo grado.

El presente esquema de diseño obtiene un modelo dinámico en parámetros concentrados de orden reducido, interpretado como un tren de N RCTAs con retromezclado. El número de RCTAs y sus volúmenes son los grados de libertad diseñados de acuerdo al objetivo de modelado particular. El método de diseño propuesto es probado y demostrado con un caso particular estudiado en la literatura mediante simulaciones (Di Blasi, 2000) y experimentos (Manurung y Beenackers, 1993), concluyendo que el comportamiento dinámico del reactor puede ser modelado adecuadamente mediante un tren de 3 (9-EDOs) a 5 (15-EDOs) RCTAs.

En la primera sección se presenta el modelo dinámico en parámetros distribuidos reducido en la forma reactiva-no reactiva obtenido tras aplicar el análisis estequiométrico de la red de reacción, así como las hipótesis de estado cuasi-estacionario para el gas y de equilibrio térmico entre las fases. Posteriormente, se desarrolla el modelo de N -RCTAs en cascada con retro-mezclado del gasificador a partir del modelo distribuido reducido de la primera sección. En la sección siguiente 6.2 se plantea el problema de diseño para los grados de libertad de la estructura del modelo de N -RCTAs. Finalmente, se muestra la efectividad del método de modelado propuesto aplicándolo en el caso de estudio del gasificador de biomasa de flujos concurrentes para cumplir dos objetivos de modelado: (i) reproducir el comportamiento local alrededor de un estado estacionario de operación con un nivel de precisión similar a la obtenida con simuladores numéricos de EDPs utilizando aproximaciones discretas de alto orden (de 1800 a 7000 EDOs), y (ii) analizar la capacidad del modelo de N -RCTAs de describir con pocos tanques (de 3 (9-EDOs) a 5 (15-EDOs) RCTAs) aspectos esenciales del comportamiento no local del gasificador como la multiplicidad de estados estacionarios y la estabilidad de estos distintos modos de operación. En las últimas secciones se presenta el análisis de los resultados de simulación correspondientes.

6.1. Modelo distribuido reducido del reactor.

En esta sección, las consideraciones estequiométricas del capítulo 3, el método de reducción de modelo y la hipótesis simplificante de equilibrio térmico de la sección 4 son aplicadas a la forma adimensional (4.2) del modelo del gasificador de lecho empacado móvil (2.4) en dos pasos:

1. Debido a que la densidad del sólido es aproximadamente tres órdenes de magnitud mayor que la del gas (y en consecuencia las diferencias de las velocidades de flujo son análogas: $u_s \ll u_g$) no hay almacenamiento de masa y calor en la fase gas, o

equivalentemente, la hipótesis de estado cuasi-estacionario en la fase gaseosa es válida (Gobel *et al.*, 2007),(Baldea y Daoutidis, 2007). Un modelo dinámico en parámetros distribuidos reducido del reactor de gasificación se obtiene al inducir dicha hipótesis (haciendo $\varepsilon = 0$) en el modelo adimensional (4.24) con equilibrio térmico entre fases ($T_s = T_g = T$) del gasificador , deducido en el capítulo A, tras considerar que la transferencia de calor entre fases es rápida (o $St_{sg} \gg 1$)

2. El modelo resultante del paso anterior se expresa en su forma reactiva-no reactiva (3.6) mediante el cambio de coordenadas de concentraciones (3.7) de las componentes químicas del sistema (\mathbf{C}_s y \mathbf{C}_g) a las concentraciones de las componentes clave reactivas (\mathbf{W}_s y \mathbf{W}_g) y no reactivas (\mathbf{E}_s y \mathbf{E}_g), presentado en el capítulo 3.

En consecuencia, la descripción de la dinámica del reactor tubular de gasificación (2.4) en términos de los operadores de transporte adimensionales τ definidos en (6.2), de las variables (6.4) y números (6.5) adimensionales, se reduce al siguiente conjunto de EDPs y ODEs:

$$\partial_t \mathbf{w}_s = \tau_s^C \{ \mathbf{w}_s \}(\mathbf{c}, \eta) + \mathbf{r}^s(\mathbf{c}, \eta) \quad (6.1a)$$

$$\partial_t \mathbf{e}_s = \tau_s^C \{ \mathbf{e}_s \}(\mathbf{c}, \eta) \quad (6.1b)$$

$$c_p^s c_s \partial_t \eta = \tau_H^C \{ \eta \}(\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{Pe_H} \tau_H^D \{ \eta \}(\mathbf{c}, \eta) + \mathcal{Q}^H(\mathbf{c}, \eta) \quad (6.1c)$$

$$0 = \tau_g^C \{ \mathbf{w}_g \}(\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{Pe_M} \tau_g^D \{ \mathbf{w}_g \}(\mathbf{c}, \eta) + \mathbf{r}^g(\mathbf{c}, \eta) \quad (6.1d)$$

$$0 = \tau_g^C \{ \mathbf{e}_g \}(\mathbf{c}, \eta) + \frac{1}{Pe_M} \tau_g^D \{ \mathbf{e}_g \}(\mathbf{c}, \eta) \quad (6.1e)$$

$$\mathbf{c} = [\mathbf{w}_s^T, \mathbf{e}_s^T, \mathbf{w}_g^T, \mathbf{e}_g^T]^T \quad (6.1f)$$

$$\mathbf{C}_\pi = \mathbf{P}_\pi^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{w}_\pi \\ \mathbf{e}_\pi \end{bmatrix} C_{\pi 0}, \quad T = \eta T_{n0}, \quad \pi = g, s \quad (6.1g)$$

con condiciones iniciales y de frontera adimensionales en términos de los operadores de frontera adimensionales β definidos en (6.3) :

$$z = 0 : \quad \beta_g \{ \mathbf{c}_g \} = 0, \quad \beta_s \{ \mathbf{c}_s \} = 0, \quad \beta_H \{ \eta \} = 0 \quad (6.1h)$$

$$z = 1 : \quad \partial_z \mathbf{c}_g = 0, \quad \partial_z \mathbf{c}_s = 0, \quad \partial_z \eta = 0 \quad (6.1i)$$

$$t = 0 : \quad \mathbf{c}_s(z, 0) = \frac{\mathbf{P}_s \mathbf{C}_{sic}}{C_{s0}}, \quad \eta(z, 0) = \frac{\alpha_g T_{gic} + \alpha_s T_{sic}}{T_{n0}} := \frac{T_{ic}}{T_{n0}} \quad (6.1j)$$

$$\mathbf{c}_s = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_s \\ \mathbf{e}_s \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c}_g = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_g \\ \mathbf{e}_g \end{bmatrix} \quad (6.1k)$$

donde \mathbf{C}_{sic} (o \mathbf{C}_{gic}) es el vector que contiene las condiciones iniciales de los perfiles espaciales axiales de las concentraciones de la fase sólida (o gaseosa) y T_{sic} (o T_{gic}) es el perfil axial inicial de la temperatura del sólido (o del gas) a lo largo del reactor.

Los términos fuente están dados por las expresiones:

$$\mathbf{r}^s(\mathbf{c}, \eta) = \mathcal{P}_s^R \mathbf{r}_s(\mathbf{c}, \eta) = K_M \mathcal{M} \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \eta) \quad (6.11)$$

$$\mathcal{Q}^H(\mathbf{c}, \eta) = \mathcal{Q}_T(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \eta) = K_M [-St_w h_w(\eta) [\eta - \eta_w] - \mathbf{B}_r^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \eta)] \quad (6.1m)$$

$$\mathbf{r}^g(\mathbf{c}, \eta) = \mathcal{P}_g^R \mathbf{r}_g(\mathbf{c}, \eta) = \mathcal{M} \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \eta) \quad (6.1n)$$

donde h_w es el coeficiente de transferencia de calor adimensional entre el lecho sólido-gas y la pared del reactor.

Los operadores de transporte adimensionales τ son:

$$\tau_g^C \{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z \left(v_g(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \eta) \mathbf{x} \right) \quad (6.2a)$$

$$\tau_g^D \{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := \partial_z \left(D_M(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \eta) \partial_z \mathbf{x} \right) \quad (6.2b)$$

$$\tau_s^C \{\mathbf{x}\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z \left(v_s(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \eta) \mathbf{x} \right) \quad (6.2c)$$

$$\tau_H^C \{\eta\}(\mathbf{c}, \eta) := -\partial_z \left(c_s c_p^s v_H(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \eta) [\eta - \eta^0] \right) + \partial_z \left(c_s c_p^s v_H(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \eta) \right) [\eta - \eta^0] \quad (6.2d)$$

$$\tau_H^D \{\eta\}(\mathbf{c}, \eta) := \partial_z \left(c_s c_p^s D_H(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \eta) \partial_z \eta \right) \quad (6.2e)$$

$$v_H = v_s + K_M \begin{bmatrix} c_p^g c_g \\ c_p^s c_s \end{bmatrix} v_g \quad (6.2f)$$

$$D_H = D_H^s + K_M \left(\frac{c_g c_p^g}{c_s c_p^s} \right) D_H^g = \frac{\lambda_n^{eff}}{c_s c_p^s}, \quad \lambda_n^{eff} = \frac{\lambda_T^{eff}}{\lambda_0} \quad (6.2g)$$

donde τ_g^C (o τ_s^C) es el operador adimensional de transporte de masa por convección para la fase gas (o sólida), τ_H^C es el operador de transporte adimensional de convección de calor total, τ_g^D (o τ_H^D) es el operador de dispersión de masa para el gas (o de calor total) del lecho empacado. v_g (o v_s) es la velocidad adimensional superficial del gas (o de flujo del sólido), v_H es el coeficiente de transporte de calor adimensional por convección del lecho dado por la ecuación (6.2f), D_M (o D_H) es el coeficiente adimensional de dispersión de masa de la fase gas (o de dispersión de calor). El coeficiente de dispersión de calor D_H en términos de la conductividad efectiva normalizada del lecho λ_n^{eff} se muestra en la ecuación (6.2g). c_π es la concentración molar total adimensional y c_p^π el calor específico molar adimensional correspondientes a la fase π .

Los operadores de frontera β son:

$$\beta_g\{\mathbf{x}\} := \frac{D_M}{Pe_M} \partial_z \mathbf{x} - v_g [\mathbf{x} - \mathbf{x}_{en}] \quad (6.3a)$$

$$\beta_s\{\mathbf{x}\} := \mathbf{x} - \mathbf{x}_{en} \quad (6.3b)$$

$$\beta_H\{\eta\} := \frac{D_H}{Pe_H} \partial_z \eta - v_H [\eta - \eta_{en}] \quad (6.3c)$$

donde los vectores \mathbf{w}_{gen} , \mathbf{E}_{gen} , \mathbf{W}_{sen} , \mathbf{E}_{sen} contienen las concentraciones adimensionales de entrada reactivas y no reactivas correspondientes a la fase gaseosa y sólida, respectivamente, y η_{en} es la temperatura adimensional promedio de los flujos alimentados al reactor.

Dicho modelo dinámico reducido de parámetros distribuidos está expresado en términos de las variables adimensionales:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_g &= \frac{\mathbf{C}_g}{C_{g0}}, \quad \mathbf{c}_s = \frac{\mathbf{C}_s}{C_{s0}}, \quad \mathbf{w}_g = \frac{\mathbf{W}_g}{C_{g0}}, \quad \mathbf{e}_g = \frac{\mathbf{E}_g}{C_{g0}}, \quad \mathbf{w}_s = \frac{\mathbf{W}_s}{C_{s0}}, \quad \mathbf{e}_s = \frac{\mathbf{E}_s}{C_{s0}}, \\ \eta &= \frac{T}{T_{n0}}, \quad \eta_w = \frac{T_w}{T_{n0}}, \quad z = \frac{Z}{L}, \quad t = \frac{u_{s0} t'}{L}, \quad v_g = \frac{u_g}{u_{g0}}, \quad v_s = \frac{u_s}{u_{s0}}, \\ D_M &= \frac{D_M}{D_{M0}}; \quad D_H = \frac{D_H}{D_{H0}}; \quad h_w = \frac{h_w}{h_{w0}}, \quad \mathcal{D}_{H0} = \frac{\lambda_0}{C_{s0} C_{p0}}, \quad \lambda_n^{eff} = \frac{\lambda_s^{eff} + \lambda_g^{eff}}{\lambda_0} \end{aligned} \quad (6.4)$$

y de los grupos adimensionales:

$$\begin{aligned} Pe_M &= \frac{L u_{g0}}{D_{M0}}, \quad Pe_H = \frac{L u_{s0}}{D_{H0}}, \quad St_w = \frac{L h_{w0} \mathcal{A}_v}{C_{s0} C_{p0} u_{s0}} \\ K_M &= \frac{C_{g0} u_{g0}}{C_{s0} u_{s0}}, \quad Da_j = \frac{LR_j(\mathbf{C}_0, T_{n0})}{u_{g0} C_{g0}}, \quad B_j = \frac{\Delta H_j^r}{C_{p0} T_{n0}} \end{aligned} \quad (6.5)$$

con valores de referencia adecuados en los denominadores de (6.4). En estas expresiones, D_H es el coeficiente de dispersión adimensional total de calor, Pe_M (o Pe_H) es número de Peclet de masa del gas (o de calor total), St_w es el número de Stanton de la pared del reactor con el lecho, \mathbf{Da} es una matriz diagonal con los m números de Damkholer (Da_j), \mathbf{B}_r es el vector de los m incrementos adiabáticos de temperatura (B_j), y \mathbf{r} es el vector con las m velocidades de reacción.

Cabe señalar que los términos fuente de masa y energía (6.11)-(6.1n), los operadores de transporte τ (6.2), las condiciones de frontera (6.1h)-(6.1i) y las condiciones iniciales (6.1j) formuladas en función de las concentraciones adimensionales originales \mathbf{c} han sido expresadas en términos de las nuevas coordenadas de concentraciones en ambas fases \mathbf{c} de acuerdo a la

siguiente transformación lineal:

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_s^T & \mathbf{c}_g^T \end{bmatrix}^T,$$

$$\mathbf{c} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}, \quad \mathbf{P}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_s^{-1} & \mathbf{0}_{N_s \times N_g} \\ \mathbf{0}_{N_g \times N_s} & \mathbf{P}_g^{-1} \end{bmatrix}$$

En el caso de estudio seleccionado del reactor de gasificación de biomasa (sección 2.7), la velocidad convectiva de la fase gas y del carbonizado son calculadas a partir de las ecuaciones de continuidad adimensionales con la hipótesis de estado cuasiestacionario para el gas:

$$\partial_z (c_g v_g) = \sum_{i=1}^{n_g} \sum_{j=1}^m s_{i,j}^g Da_j r_j \quad (6.6a)$$

$$\varrho_{C,pyr} \partial_z v_s = -(Da_2 r_2 + Da_3 r_3 + Da_4 r_4) \quad (6.6b)$$

donde $\varrho_{C,pyr}$ es la concentración de carbonizado adimensional o la concentración del sólido después de la pirólisis.

El modelo precedente (6.1) constituye una versión adimensional de orden reducido en la forma reactiva-no reactiva de los modelos de gasificadores desarrollados en la literatura reciente (Di Blasi, 2000), (Di Blasi, 2004), (Grieco y Baldi, 2011), con un menor número de ecuaciones dinámicas: $n_s + 1$ EDPs y n_g EDOs con dos condiciones a la frontera en la variable espacial axial adimensional. z .

6.2. Modelo reducido en parámetros concentrados

En esta sección se aborda el problema de deducir un modelo de dimensión finita que capture la naturaleza distribuida del gasificador de lecho móvil a partir del modelo reducido de parámetros distribuidos (6.1) mediante un esquema de discretización espacial (Badillo-Hernández y Alvarez-Icaza, 2010). Las nociones de estructura de sistemas dinámicos utilizadas en este esquema de modelado se enuncian a continuación:

- **Estructura.** Está caracterizada por dos propiedades de un sistema dinámico:
 1. *Dimensión (M).* Es el número de EDOs de primer orden que componen el modelo en parámetros concentrados del reactor, es decir, la dimensión del espacio donde evolucionan las variables de estado del sistema dinámico.
 2. *Interacción entre subsistemas.* Es el grado de acoplamiento de las EDOs. La interacción entre los componentes básicos del sistema (cada EDO o ecuación de estado) está dada por la dependencia relativa de la dinámica de cada variable de estado del resto de las variables. Por lo tanto, se pueden distinguir dos extremos

de acoplamiento: (i) interactividad nula y (ii) acoplamiento completo, es decir, la dinámica de todos los estados depende de todos los estados fuertemente.

- **Complejidad de modelo.** Es una característica del modelo determinada por un criterio o indicador en función de los dos componentes de la estructura. Una medida de la complejidad del modelo es una función creciente de M y del grado de interactividad del sistema, por lo que un modelo de estructura simple es aquel que posee un orden reducido M y un acoplamiento débil entre sus EDOs.

De acuerdo a las consideraciones establecidas en el capítulo 5, una interconexión en cascada de N RCTAs con retromezclado de masa y energía constituye la estructura adecuada para el propósito perseguido en esta tesis debido a que exhibe un acoplamiento relativamente débil entre sus subsistemas básicos (RCTAs) y retiene la naturaleza distribuida de los reactores tubulares de lecho empacado con dispersión. Es por ello que la discretización espacial del reactor debe ser llevada a cabo usando cualquier método numérico capaz de preservar el mecanismo de transporte convectivo-dispersivo, en el cual la dinámica de las variables en el k -ésimo nodo de la malla espacial axial debe depender de las variables en los nodos vecinos ($k + 1$ y $k - 1$) y de sí mismas.

Por simplicidad, la discretización espacial del modelo distribuido del reactor (6.1) se realiza mediante el esquema de diferencias finitas de primer orden presentado en la sección 5.4 utilizando una malla adaptable de tamaño $N_z = N + 2$. El modelo dinámico resultante es análogo al modelo discretizado completo (5.7) y consiste en N subsistemas de parámetros concentrados (volúmenes de control correspondientes a los nodos internos de la malla: $N_z - 2$) representados por un conjunto de $M = N \times (n_s + 1)$ EDOs acopladas con $Nv = N \times (n_g)$ ecuaciones algebraicas (AEs). En dicho modelo las restricciones algebraicas constituyen balances molares en estado cuasiestacionario de las pseudo-especies gaseosas en cada volumen de control, mientras que las EDOs representan los balances molares dinámicos de las pseudo-componentes sólidas y los balances de energía de la temperatura adimensional del lecho en cada celda o volumen de control.

La solución de las Nv ecuaciones algebraicas para las variables estáticas de las concentraciones de las pseudo-especies gaseosas (contenidas en el vector \mathbf{y}) en términos de las concentraciones dinámicas adimensionales sólidas y la temperatura adimensional agrupadas en el vector \mathbf{x} , seguida de su sustitución en las M EDOs, produce el modelo en parámetros concentrados en la forma de sistema de procesos por etapas:

$$\dot{\mathbf{x}}_1 = \mathbf{f}_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{u}) \quad (6.7a)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_k = \mathbf{f}_k(\mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_{k+1}), \quad k = 2, \dots, N - 1 \quad (6.7b)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_N = \mathbf{f}_N(\mathbf{x}_{N-1}, \mathbf{x}_N) \quad (6.7c)$$

$$\mathbf{y}_j = \mathbf{h}_j(\mathbf{x}_{j-1}, \mathbf{x}_j), \quad j = 1, \dots, N \quad (6.7d)$$

donde

$$\mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_{s,j} \\ \mathbf{e}_{s,j} \\ \eta_j \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}_j = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_{g,j} \\ \mathbf{e}_{g,j} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_e \\ \mathbf{y}_e \\ \mathbf{q}_e \end{bmatrix} \quad j = 1, \dots, N, e \quad (6.8)$$

$\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ son los estados dinámicos, \mathbf{u} es el vector de entrada exógena con el vector de flujos alimentados \mathbf{q}_e , el vector de los valores de alimentación de las concentraciones adimensionales para las pseudo-especies del gas \mathbf{y}_e , así como, el vector de concentraciones adimensionales de las pseudo-especies y la temperatura adimensional de alimentación \mathbf{x}_e .

El vector de las variables dinámicas \mathbf{x}_k contiene los valores en el nodo k -ésimo de la malla espacial de la temperatura adimensional (η_k) y de las concentraciones adimensionales de las pseudo-especies sólidas ($\mathbf{w}_{s,k}$, $\mathbf{e}_{s,k}$), mientras que el vector de variables estáticas \mathbf{y}_k incluye los valores en el nodo k -ésimo de la malla espacial de las concentraciones adimensionales de las pseudo-especies en la fase gaseosa ($\mathbf{w}_{g,k}$, $\mathbf{e}_{g,k}$).

En lo sucesivo se obtiene una representación del gasificador como un tren de N RCTAs con volúmenes V_1, V_2, \dots, V_N y flujos bidireccionales (hacia adelante y hacia atrás), por medio de la discretización espacial con diferencias finitas del modelo reducido de parámetros distribuidos del reactor (6.1). Posteriormente se realiza una interpolación espacial para recuperar los perfiles espaciales continuos de las variables del gasificador. La estructura del modelo de N -RCTAs obtenida es el punto de partida del método de diseño de modelo presentado en la sección 6.3, en el que el número de RCTAs N y sus volúmenes V_1, V_2, \dots, V_N son considerados los grados de libertad del modelo que pueden ser elegidos de acuerdo a la precisión del modelo requerida y/o a la incertidumbre experimental asociada.

6.2.1. Modelo de N -RCTAs del gasificador.

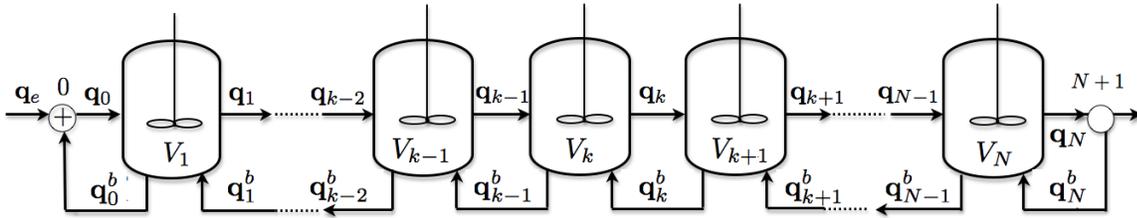


Figura 6.1: Tren de N RCTAs con flujos de retro-mezclado.

El presente segmento está dedicado a representar el gasificador de lecho móvil como una cascada N RCTAs con retro-mezclado de acuerdo a la obra clásica de (Coste *et al.*, 1961), (Aris, 1961), (Deans y Lapidus, 1960) y el estudio reciente de (Najera, 2012) para un reactor tubular exotérmico de una sola componente (sistema de 2 EDPs), el cual exhibe un comportamiento no lineal complejo similar al mostrado por el reactor de gasificación de lecho móvil. La reformulación e interpretación de la sección 5.4 es aplicada al conjunto

de ecuaciones diferenciales-algebraicas obtenido a partir de la discretización espacial por diferencias finitas del modelo reducido de parámetros distribuidos (6.1) para generar el modelo reducido adimensional de N -RCTAs (6.9) con volúmenes V_1, V_2, \dots, V_N y flujos de retromezclado de masa y calor $\mathbf{q}_0^b, \mathbf{q}_1^b, \dots, \mathbf{q}_N^b$ como se ilustra en la figura 6.1.

Primer RCTA ($k = 1$)

$$\mathcal{V}_1 \dot{\mathbf{w}}_{s,1} = q_e^{Ms} \mathbf{w}_{s,e} - q_1^{Ms} \mathbf{w}_{s,1} + K_M \mathbf{M} \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}_1 \mathcal{V}_1 \quad (6.9a)$$

$$\mathcal{V}_1 \dot{\mathbf{e}}_{s,1} = q_e^{Ms} \mathbf{e}_{s,e} - q_1^{Ms} \mathbf{e}_{s,1} \quad (6.9b)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_1 \dot{\eta}_1 &= \left(\frac{c_{s,0} c_{p,0}^s}{c_{s,1} c_{p,1}^s} \right) (q_e^H \eta_e - q_{out,1}^H \eta_1) - \left(\frac{1}{c_{s,1} c_{p,1}^s} \right) K_M \mathbf{B}_r^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}_1 \mathcal{V}_1 \\ &\quad + q_1^{b,H} \eta_2 - \left(\frac{1}{c_{s,1} c_{p,1}^s} \right) K_M St_w h_w(\eta_1) [\eta_1 - \eta_w] \mathcal{V}_1 \end{aligned} \quad (6.9c)$$

$$0 = q_e^{Mg} \mathbf{w}_{g,e} - q_1^{Mg} \mathbf{w}_{g,1} + q_1^{b,Mg} \mathbf{w}_{g,2} + \mathbf{M} \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}_1 \mathcal{V}_1 \quad (6.9d)$$

$$0 = q_e^{Mg} \mathbf{e}_{g,e} - q_1^{Mg} \mathbf{e}_{g,1} + q_1^{b,Mg} \mathbf{e}_{g,2} \quad (6.9e)$$

RCTAs interiores ($2 \leq k \leq N - 1$)

$$\mathcal{V}_k \dot{\mathbf{w}}_{s,k} = q_{k-1}^{Ms} \mathbf{w}_{s,k-1} - q_k^{Ms} \mathbf{w}_{s,k} + K_M \mathbf{M} \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}_k \mathcal{V}_k \quad (6.9f)$$

$$\mathcal{V}_k \dot{\mathbf{e}}_{s,k} = q_{k-1}^{Ms} \mathbf{e}_{s,k-1} - q_k^{Ms} \mathbf{e}_{s,k} \quad (6.9g)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_k \dot{\eta}_k &= \left(\frac{c_{s,k-1} c_{p,k-1}^s}{c_{s,k} c_{p,k}^s} \right) (q_{k-1}^H \eta_{k-1} - q_{out,k}^H \eta_k) - \left(\frac{1}{c_{s,k} c_{p,k}^s} \right) K_M \mathbf{B}_r^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}_k \mathcal{V}_k \\ &\quad + q_k^{b,H} \eta_{k+1} - q_{k-1}^{b,H} \eta_k - \left(\frac{1}{c_{s,k} c_{p,k}^s} \right) K_M St_w h_w(\eta_k) [\eta_k - \eta_w] \mathcal{V}_k \end{aligned} \quad (6.9h)$$

$$0 = q_{k-1}^{Mg} \mathbf{w}_{g,k-1} - q_k^{Mg} \mathbf{w}_{g,k} + q_k^{b,Mg} \mathbf{w}_{g,k+1} - q_{k-1}^{b,Mg} \mathbf{w}_{g,k} + \mathbf{M} \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}_k \mathcal{V}_k \quad (6.9i)$$

$$0 = q_{k-1}^{Mg} \mathbf{e}_{g,k-1} - q_k^{Mg} \mathbf{e}_{g,k} + q_{k+1}^{b,Mg} \mathbf{e}_{g,k+1} - q_k^{b,Mg} \mathbf{e}_{g,k} \quad (6.9j)$$

Último RCTA ($k = N$)

$$\mathcal{V}_N \dot{\mathbf{w}}_{s,N} = q_{N-1}^{Ms} \mathbf{w}_{s,N-1} - q_N^{Ms} \mathbf{w}_{s,N} + K_M \mathbf{M} \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}_N \mathcal{V}_N \quad (6.9k)$$

$$\mathcal{V}_N \dot{\mathbf{e}}_{s,N} = q_{N-1}^{Ms} \mathbf{e}_{s,N-1} - q_N^{Ms} \mathbf{e}_{s,N} \quad (6.9l)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_N \dot{\eta}_N &= \left(\frac{c_{s,N-1} c_{p,N-1}^s}{c_{s,N} c_{p,N}^s} \right) q_{N-1}^H (\eta_{N-1} - \eta_N) - \left(\frac{1}{c_{s,N} c_{p,N}^s} \right) K_M \mathbf{B}_r^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}_N \mathcal{V}_N \\ &\quad - \left(\frac{1}{c_{s,N} c_{p,N}^s} \right) K_M St_w h_w(\eta_N) [\eta_N - \eta_w] \mathcal{V}_N \end{aligned} \quad (6.9m)$$

$$0 = q_{N-1}^{Mg} \mathbf{w}_{g,N-1} - \left(q_N^{Mg} - q_N^{b,Mg} \right) \mathbf{w}_{g,N} + \mathbf{M} \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}_N \mathcal{V}_N - q_{N-1}^{b,Mg} \mathbf{w}_{g,N} \quad (6.9n)$$

$$0 = q_{N-1}^{Mg} \mathbf{e}_{g,N-1} - \left(q_N^{Mg} - q_N^{b,Mg} \right) \mathbf{e}_{g,N} - q_{N-1}^{b,Mg} \mathbf{e}_{g,N} \quad (6.9ñ)$$

donde

$$q_{out,k}^H = \left(q_{k-1}^H - q_{k-1}^{b,H} \right) + \left(\frac{c_{s,k} c_{p,k}^s}{c_{s,k-1} c_{p,k-1}^s} \right) q_k^{b,H} \quad (6.9o)$$

$$\mathbf{q}_e = \begin{bmatrix} q_e^{Ms} \\ q_e^H \\ q_e^{Mg} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q}_k = \begin{bmatrix} q_k^{Ms} \\ q_k^H \\ q_k^{Mg} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q}_k^b = \begin{bmatrix} q_k^{b,Mg} \\ q_k^{b,H} \\ q_k^{b,Mg} \end{bmatrix} \quad (6.9p)$$

$$\mathcal{V}_k = \frac{V_k}{V_R} = \frac{\Delta Z_k A_k}{L A_R} = \Delta z_k \mathcal{A}_k, \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (6.9q)$$

$$\mathbf{r}^s(\mathbf{c}_k, \eta_k) = \mathcal{P}_s^R \mathbf{r}_s(\mathbf{c}_k, \eta_k) = K_M \mathcal{M} \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}_k, \eta_k) \quad (6.9r)$$

$$\mathcal{Q}^H(\mathbf{c}_k, \eta_k) = K_M [-St_w h_w(\eta_k) [\eta_k - \eta_w] - \mathbf{B}_r^T \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}_k, \eta_k)] \quad (6.9s)$$

$$\mathbf{r}^g(\mathbf{c}_k, \eta_k) = \mathcal{P}_g^R \mathbf{r}_g(\mathbf{c}_k, \eta_k) = \mathcal{M} \mathbf{D} \mathbf{a} \mathbf{r}(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{c}_k, \eta_k) \quad (6.9t)$$

En los nodos frontera de la malla espacial:

$$\mathbf{q}_0 \phi_0 = \mathbf{q}_e \phi_e + \mathbf{q}_1^b \phi_1, \quad \text{en } z = 0 \quad (6.9u)$$

$$\phi_{N+1} = \phi_N, \quad \text{en } z = 1 \quad (6.9v)$$

donde

$$\mathbf{q}_e = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_e^{Ms} \\ \mathbf{q}_e^H \\ \mathbf{q}_e^{Mg} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_{s,e} A_R \\ v_{H,e} A_R \\ v_{g,e} A_R \end{bmatrix}, \quad \phi_k = \begin{bmatrix} \mathbf{w}_{s,k} \\ \mathbf{e}_{s,k} \\ \eta_k \\ \mathbf{w}_{g,k} \\ \mathbf{e}_{g,k} \end{bmatrix}, \quad k = 0, \dots, N + 1, e \quad (6.9w)$$

$v_{g,en}, v_{s,e}$ son las velocidades adimensionales de los flujos alimentados y ϕ_k es el vector de los valores instantáneos de las concentraciones adimensionales de las pseudo-especies sólidas y gaseosas, así como de la temperatura adimensional en el k -ésimo nodo de la malla espacial a lo largo del gasificador.

\mathcal{V}_k es el volumen adimensional del k -ésimo RCTA, Δz_k es la distancia adimensional entre el k -ésimo nodo y el $k - 1$ -ésimo nodo de la malla espacial de la discretización por diferencias finitas, y \mathcal{A}_k es el área transversal adimensional del k -ésimo RCTA, la cual es $\mathcal{A}_k = 1$ para $k = 1, 2, \dots, N$, de acuerdo al esquema de discretización espacial adoptado en el que $A_k = A_R$ para $k = 1, 2, \dots, N$.

Las condiciones de frontera en $z = 0$ (6.1h), (6.3) discretizadas producen ecuaciones de balance de masa y energía de un mezclador (6.9u), mientras que en el nodo frontera de salida ($k = N + 1$), ecuaciones de balance triviales (6.9v) resultan de discretizar las condiciones de frontera tipo von Neumann en $z = 1$ (6.1i).

Las ecuaciones de balance en la frontera de entrada (6.9u) y las ecuaciones de balance

en la frontera de salida del reactor (6.9v) son sustituidas en las ecuaciones de balance (6.9f)-(6.9j) para obtener expresiones simplificadas para los modelos del primer RCTA (6.9a)-(6.9e) y el último RCTA (6.9k)-(6.9ñ).

Este modelo dinámico (6.9) de dimensión finita M es el modelo adimensional de una cascada de N RCTAs (5.9) en la forma reactiva-no reactiva (sección 3.2) y de orden reducido de acuerdo a la hipótesis de estado cuasiestacionario para la fase gas y de equilibrio térmico entre fases (sección 4).

En el modelo (6.9), la interconexión hacia atrás (retroalimentación) a través de los flujos adimensionales del vector \mathbf{q}_k^b que representa el retromezclado del calor y la masa en el reactor por dispersión (6.10b). Por otro lado, el transporte por convección forzada, desarrollado principalmente en una dirección espacial (hacia adelante), sólo se incluye en los flujos volumétricos adimensionales hacia adelante (de realimentación) contenidos en el vector \mathbf{q}_k de acuerdo a la expresión (6.10a).

Las velocidades convectivas (v_π y v_H) y los coeficientes de dispersión (D_M y D_H) del reactor tubular de gasificación (6.1) se relacionan con el vector de flujos hacia adelante (\mathbf{q}_k) y el vector de flujos de retro-mezclado (\mathbf{q}_k^b) del conjunto de N -RCTAs (6.9) de la siguiente forma:

$$\mathbf{q}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_k^{Ms} \\ \mathbf{q}_k^H \\ \mathbf{q}_k^{Mg} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_{s,k}\mathcal{A}_k \\ v_{H,k}\mathcal{A}_k + \frac{D_{H,k}\mathcal{A}_k}{Pe_H\Delta z_{k+1}} \\ v_{g,k}\mathcal{A}_k + \frac{D_{M,k}\mathcal{A}_k}{Pe_M\Delta z_{k+1}} \end{bmatrix} \quad (6.10a)$$

$$\mathbf{q}_k^b = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_k^{b,Ms} \\ \mathbf{q}_k^{b,H} \\ \mathbf{q}_k^{b,Mg} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{D_{H,k}\mathcal{A}_k}{Pe_H\Delta z_{k+1}} \\ \frac{D_{M,k}\mathcal{A}_k}{Pe_M\Delta z_{k+1}} \end{bmatrix} \quad (6.10b)$$

La aplicación del presente método de modelado al reactor de gasificación del caso de estudio (sección 2.7) produce un modelo de N -RCTAs de la forma (5.9), con las velocidades de flujo obtenidas a partir de las expresiones (Di Blasi, 2000):

$$v_{g,k}c_{g,k} = v_{g,k-1}c_{g,k-1} + \sum_{i=1}^{n_g} \sum_{j=1}^{NR} \nu_{i,j} Da_{j,k} r_{j,k} \quad (6.11a)$$

$$v_{s,k} = v_{s,k-1} - \frac{(Da_{G1,k}r_{G1,k} + Da_{G2,k}r_{G2,k} + Da_{C5,k}r_{C5,k})}{c_{C,pyr}} \quad (6.11b)$$

obtenidas al discretizar las ecuaciones de continuidad del caso de estudio (6.6a)-(6.6b).

6.2.2. Interpolación de los perfiles espaciales.

El modelo dinámico en parámetros concentrados dado por las ecuaciones (6.9a)-(6.9ñ), (6.9u)-(6.9v) describe la evolución de las variables contenidas en los $N_z = N + 2$ vectores ϕ_k , los cuales contienen los valores de las $n_s + n_g$ concentraciones adimensionales de las

componentes químicas y de la temperatura adimensional del lecho en la ubicación axial del reactor dada por el k -ésimo nodo de la malla espacial de acuerdo a la expresión (6.9w). En consecuencia, el conjunto de vectores ϕ_k provee perfiles espaciales discretos de concentración y temperatura del reactor. Con el objetivo de recuperar los perfiles espaciales continuos de las concentraciones de las especies químicas y la temperatura a lo largo del gasificador, se lleva a cabo una interpolación de los valores nodales de concentración y temperatura en ϕ_k por medio de *splines* (polinomios a trozos) (de~Boor, 2001) .

Los vectores ϕ_k son agrupados en una matriz Φ (6.12) para conveniencia del procedimiento de interpolación descrito.

$$\Phi(t) = \left[\phi_0(t), \quad \phi_1(t) \quad \cdots \quad \phi_{N+1}(t) \right] \quad (6.12)$$

Por lo tanto, la l -ésima fila de la matriz Φ denotada como Φ_l contiene la secuencia de los N_z valores nodales de la l -ésima variable del modelo en un instante de tiempo.

De esta forma, el comportamiento espacial y temporal de las $n_s + n_g + 1$ variables del modelo distribuido están dadas por la siguiente ecuación de salida:

$$\Phi_l(t, z) = \sum_{r=1}^{N_z} a_r^l(t) B_{2,r}(z), \quad l = 1, \dots, n_s + n_g + 1 \quad (6.13)$$

donde $B_{2,r}(z)$ es el r -ésimo spline básico cuadrático con la secuencia de nudos (puntos de unión de cada polinomio): $x_1 \leq x_2 \leq \cdots \leq x_{N_z+2} \leq x_{N_z+3}$ calculado en términos de los nodos de la malla espacial ($z_0 = 0 < z_1 < \cdots < z_N < z_{N+1} = 1$) de acuerdo a la siguiente expresión:

$$x_r = \begin{cases} z_0, & 1 \leq r \leq 3 \\ \frac{z_{r-3} + z_{r-2}}{2}, & 4 \leq r \leq N_z \\ z_{N+1}, & N_z + 1 \leq r \leq N_z + 3 \end{cases} \quad (6.14)$$

y el *spline* $B_{2,r}(z)$ está dado por la siguiente ecuación:

$$\begin{cases} \frac{(z-x_r)^2}{(x_{r+2}-x_r)(x_{r+1}-x_r)}, & x_r < z \leq x_{r+1} \\ \frac{(z-x_r)(x_{r+2}-z)}{(x_{r+2}-x_r)(x_{r+2}-x_{r+1})} + \frac{(x_{r+3}-z)(z-x_{r+1})}{(x_{r+3}-x_{r+1})(x_{r+2}-x_{r+1})}, & x_{r+1} < z \leq x_{r+2} \\ \frac{(x_{r+3}-z)^2}{(x_{r+3}-x_{r+2})(x_{r+3}-x_{r+1})}, & x_{r+2} < z \leq x_{r+3} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6.15)$$

Los coeficientes $a_r^l(t)$ son la solución al siguiente sistema algebraico de condiciones de interpolación:

$$\sum_{r=1}^{N_z} a_r^l(t) B_{2,r}(z_k) = \Phi_{l,k}(t), \quad k = 1, \dots, N_z \quad (6.16)$$

donde $\Phi_{l,k}(t)$ es el elemento de la l -ésima fila y de la k -ésima columna de la matriz Φ que corresponde al comportamiento temporal de la l -ésima variable en el k -ésimo nodo de la malla espacial.

6.3. Problema de diseño de modelo.

En esta sección, se trata el problema de diseñar un modelo dinámico en parámetros concentrados de dimensión (número de EDOs) lo más baja posible en función del objetivo específico de modelado y la incertidumbre experimental del reactor.

La estructura del modelo de N -RCTAs (6.9) posee 4 grupos de parámetros relacionados con el carácter distribuido del gasificador:

1. El número de RCTAs (N). Es el número de etapas que componen al sistema de procesos equivalente.
2. Los volúmenes de los RCTAs (V_1, V_2, \dots, V_N). Determina el tamaño de los N tanques agitados donde se lleva a cabo la reacción de gasificación.
3. Los flujos directos o hacia adelante ($\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N$). Contienen los efectos de los fenómenos de transporte advectivos y dispersivos en los balances de masa y energía.
4. Los flujos de retro-mezclado ($\mathbf{q}_0^b, \mathbf{q}_1^b, \dots, \mathbf{q}_N^b$). Proveen la intensidad del flujo de masa y calor en sentido contrario al flujo directo convectivo.

De acuerdo a la equivalencia entre el modelo distribuido del gasificador (6.1) y el tren de N -RCTAs (6.9) establecida en la sección 6.2.1, los parámetros de flujo se obtienen a partir de los parámetros de transporte convectivo y dispersivo del modelo distribuido mediante las expresiones (6.10a)-(6.10b), mientras que no existe un criterio de selección con sentido físico directo para el número de etapas N y sus tamaños V_1, V_2, \dots, V_N . Es por ello que el enfoque del presente estudio consiste en postular al número de RCTAs N y sus volúmenes V_1, V_2, \dots, V_N como grados de libertad del modelo que pueden ser elegidos en función de la precisión requerida por el propósito específico de modelado a la luz de la incertidumbre experimental del sistema en particular.

El modelo de N -RCTAs (6.9) de un gasificador es un sistema dinámico en parámetros concentrados de dimensión $M = N \times (n_s + 1)$ restringido por $Nv = N \times (n_g)$ ecuaciones algebraicas (EA), donde el número de RCTAs (N) es el grado de libertad en el diseño del modelo que afecta directamente a la complejidad del modelo (la dimensión). Entonces, dado un reactor específico, la dimensión del modelo puede ser tan baja como sea posible (porque n_s suele ser un número pequeño en gasificadores) manteniendo pequeño el número de RCTAs (N) necesarios para alcanzar el grado de precisión requerido por el propósito de modelado específico.

Un criterio clásico del análisis numérico para la selección de N y V_1, V_2, \dots, V_N proviene de los esquemas de discretización espacial con malla adaptable. El ajuste en los volúmenes

de los tanques puede realizarse en cada instante de tiempo mediante un método adaptivo global de la malla espacial:

1. Se aplica el principio de equidistribución en una función monitor del perfil de temperatura debido a que es el que tiene cambios más abruptos para calcular la nueva malla (nuevos valores de volumen de los tanques).
2. Interpolan los valores de las variables de estado de la malla anterior a la nueva malla.

Sin embargo, dichos criterios numéricos de selección no incorporan la precisión del modelo en función del objetivo de modelado y la incertidumbre del mismo.

En este estudio se propone un método de diseño de modelo donde el número de RCTAs (N) y sus volúmenes (V_1, V_2, \dots, V_N) son seleccionados de acuerdo al propósito de modelado prescrito (diseño de equipo y/o proceso o estrategia de monitoreo y/o control), la incertidumbre experimental y paramétrica del modelo. Se enumeran a continuación los dos pasos del método de sintonización:

1. El primer paso consiste en determinar el menor número de RCTAs (N) de idéntico volumen ($V_1 = V_2 = \dots = V_N = V$, lo cual es equivalente a utilizar una malla espacial uniforme), que captura el comportamiento espacio-temporal del reactor con el grado de precisión requerido por el propósito de modelado. Para ello, se incrementa el número de tanques N hasta que el comportamiento de las variables de salida esté descrito el grado de precisión necesario.
2. Posteriormente, el número de tanques (N) obtenido en el primer paso es disminuido y los volúmenes (V_1, V_2, \dots, V_N) son ajustados para cumplir el objetivo de modelado con el menor número de tanques, o equivalentemente, estableciendo una malla espacial no uniforme de discretización. En este paso, los volúmenes de los RCTAs (V_1, V_2, \dots, V_N) son ajustados de acuerdo a características clave de la forma de los perfiles espaciales discretos obtenidos en el primer paso como la ubicación axial de capas límites (identificación de múltiples escalas de tiempo y espacio) y la distribución espacial de los frentes de reacción más importantes (pirólisis, combustión, gasificación) a lo largo del reactor tubular de lecho empacado.

El modelo de N -tanques con volumen idéntico ($V_1 = V_2 = \dots = V_N = V$) producido en el primero paso del procedimiento de diseño constituye un primer modelo de orden reducido que facilita la realización del segundo paso de diseño porque proporciona una estimación inicial del menor número de tanques (N) y los volúmenes correspondientes (V_1, V_2, \dots, V_N) necesaria para alcanzar las demandas de modelado en términos de la precisión. En consecuencia, es posible omitir el primer paso del procedimiento de diseño y realizar el diseño de N and V_1, V_2, \dots, V_N con base en la forma de los perfiles espaciales obtenidos de un modelo más detallado desarrollado en la literatura. Sin embargo, tal esquema de adaptación simultánea de N and V_1, V_2, \dots, V_N sin una estimación inicial constituye una tarea factible pero más compleja.

Tabla 6.1: Modelos matemáticos para control, diseño de equipo y proceso.

Característica	(Di Blasi, 2000), (Di Blasi, 2004)	(Gobel <i>et al.</i> , 2007)	(Rogel y Aguillon, 2006)	Modelo de 3-tanques (Este estudio)
# de componentes químicos	$n_s = 3, n_g = 8$	$n_s = 2, n_g = 6$	$n_s = 3, n_g = 7$	$n_s = 3, n_g = 7,$ $N_g = 5^*$
# de reacciones	$m = 12, NRs = 5$	$m = 4, NRs = 2$	$m = 10, NRs = 4$	$m = 8, NRs = 4$
# de EDPs	14 EDPs	3 EDPs + 1 EDO	18 EDPs	3 EDPs + 9 EDOs
Hipótesis de EQS para fase gas	No	Sí	No	Sí
Discretización espacial (N : nodos internos de la malla)	Diferencias finitas ($N \approx 250 - 500$)	Volumen finito (N no disponible)	CFD Volumen finito (malla 2D radial-axial) (5×20) ($N \approx 100$)	Diferencias finitas + Interpolación ($N = 3$)
# de EDOs (M) de discretización	$M = 3500 - 7000$	$M = 3 \times N$ EDOs + N EAs	$M = 1800$	$M = 9$ EDOs + 27 EAs

* Número de componentes reactivos clave en la fase gas

6.4. Simulaciones numéricas.

De acuerdo a estudios de simulación y resultados experimentales previos (Di Blasi, 2000; Barrio *et al.*, 2001), dos modos de operación cualitativamente diferentes (la posición y longitud de las zonas de combustión, pirólisis y reducción a lo largo del reactor son diferentes) caracterizan el comportamiento de gasificadores de flujos descendentes: reacción estabilizada en la cima y reacción estabilizada en el fondo del reactor. En esta sección, el método de diseño de dos pasos del modelo de N -RCTAs se aplica al reactor de gasificación de biomasa de flujos descendentes (sección 2.7). El objetivo de modelado consiste en reproducir el comportamiento dinámico y estático alrededor del estado estacionario de reacción estabilizada en la cima del reactor, con el menor número de EDOs posible y una capacidad de descripción similar a la de los resultados de estudios previos con métodos numéricos de simulación de EDPs. Como referencia, las primeras tres columnas de la tabla 6.2 resume los resultados de estudios previos de simulación (Di Blasi, 2000; Rogel y Aguillon, 2006) y experimentales (Manurung y Beenackers, 1993).

Cabe señalar que el interés en el equilibrio con reacción estabilizada en la cima del reactor se debe a que éste se considera el modo de operación más eficiente en términos de energía y de conversión del reactante sólido, en la literatura reciente (Di Blasi, 2000).

Los resultados de simulación numérica del modelo de N -RCTAs propuesto (5.9) para el gasificador de biomasa, con número de tanques y volúmenes ajustables, son obtenidos utilizando las densidades y parámetros de cinética química y de transporte tomadas de Di Blasi (2000) y Badillo-Hernández (2009), y condiciones iniciales cercanas al modo de operación con reacción estabilizada en la cima.

6.4.1. Comportamiento estático.

En el primer paso del método de diseño, un tren de $N = 12$ RCTAs con volumen uniforme ($V_1 = V_2 = \dots = V_N = V = \frac{1}{12}V_R$) es necesario para capturar el comportamiento de las variables de salida con una precisión similar a los estudios previos de acuerdo a la tabla 6.2, incluyendo los perfiles espaciales de las velocidades de las reacciones rápidas, y en particular la localización de sus frentes de reacción (figura 6.3b). Mientras que, en el segundo paso, se encontró que para cumplir el objetivo de modelado un tren bidireccional de $N = 3$ RCTAs con volúmenes diferentes seleccionados con base en la ubicación de las reacciones rápidas: 2 tanques pequeños ($V_1 = \frac{4}{50}V_R$ y $V_2 = \frac{6}{50}V_R$) para capturar las variaciones abruptas (gradientes espaciales grandes) de los perfiles espaciales en las zonas de combustión y pirólisis cerca de la cima del gasificador y 1 RCTA grande ($V_3 = \frac{4}{5}V_R$) para describir los perfiles espaciales suaves desarrollados en la zona de reducción.

Alterativamente, la selección del número de tanques y sus volúmenes puede realizarse de acuerdo a la localización de las reacciones rápidas derivada de un modelo más detallado previamente desarrollado. Di Blasi (2000). En consecuencia, el primer paso del procedimiento de diseño, es decir, el modelo de $N = 12$ tanques de idéntico volumen puede ser omitido, implicando una tarea de modelado más complicada debido a la ausencia de un estimado inicial del orden (en esencia N) del modelo reducido en parámetros concentrados.

El comportamiento en estado estacionario de los modelos de 12 RCTAs (malla uniforme de 14 nodos) y de 3 RCTAs (malla no uniforme y racional de 5 nodos) se muestra en las figuras 6.2-6.3, incluyendo: (i) los perfiles espaciales de concentración, temperatura y densidades aparentes del sólido correspondientes a los modelos de 12 y 3 tanques (figura 6.2), y (ii) los perfiles espaciales de las velocidades convectivas de ambas fases, así como de las velocidades de reacción del modelo de 3 tanques (figura 6.3). En la tabla 6.2, los resultados del presente esquema de modelado son comparados con aquellos obtenidos con EDP en estudios previos, mostrando que el modelo de 3 tanques captura (dentro del error experimental y paramétrico inherente a los estudios previos) el comportamiento de los modelos distribuidos basados en EDPs.

6.4.2. Dinámica local del reactor.

Con el objetivo de analizar el comportamiento dinámico local del gasificador en una región vecina al estado estacionario bajo estudio, se induce un transitorio al fijar las condiciones iniciales de los modelos de 12-RCTAs y 3-RCTAs cerca del modo de operación con reacción estabilizado en la cima: $T_k = 700K$, $C_{B,k} = 5kmol/m^3$, $C_{Char,k} = 1.7kmol/m^3$ para todos los RCTAs. Las respuestas correspondientes se presentan en la figuras 6.4-6.6: (i) las densidades aparentes del sólido (biomasa y carbonizado) y la temperatura del flujo efluente, así como la temperatura máxima del lecho (figura 6.4), (ii) el flujo de gas de síntesis producido y su poder calórico alto (figura 6.5) y (iii) las concentraciones molares de los principales componentes combustibles en el gas: CO y H_2 (figura 6.6).

En términos del tiempo de respuesta (de 15 a 50 minutos) y el sobrepaso, el comporta-

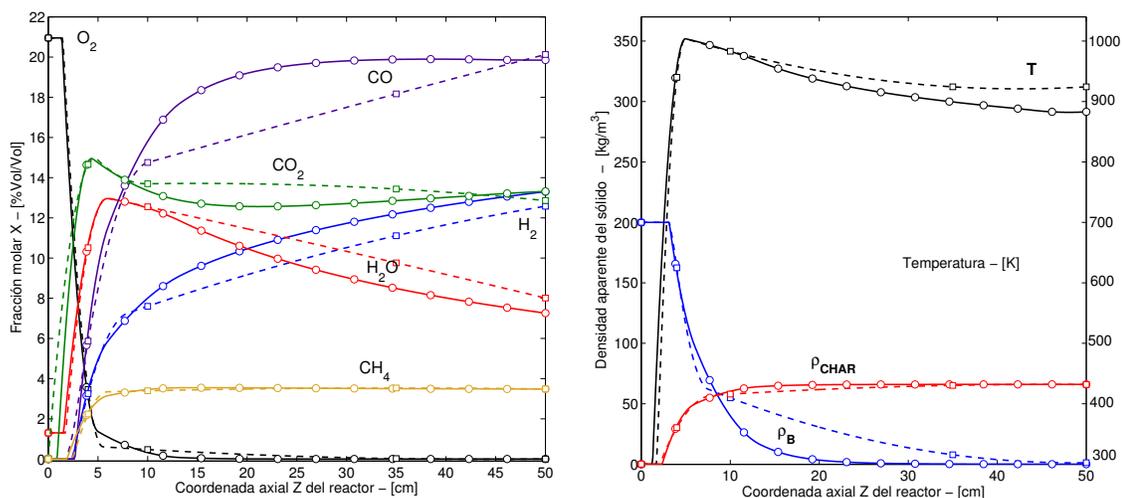


Figura 6.2: Perfiles espaciales de las concentraciones del gas, temperatura y densidades de biomasa y carbonizado en estado estacionario obtenidos con modelos de 3-RCTAs de volumen diferente (gráfica punteada) y 12-RCTAs con volumen uniforme (gráfica sólida).

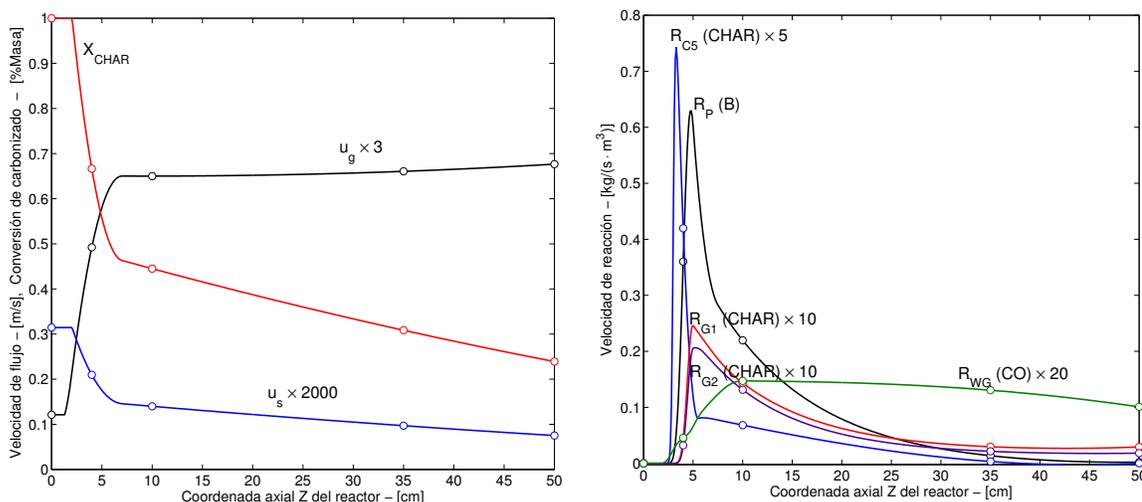


Figura 6.3: Perfiles espaciales de las velocidades convectivas del sólido y gas, conversión de carbonizado y velocidades de reacción en estado estacionario obtenidos con el modelo de 3-RCTAs de volumen diferente.

miento transitorio del modelo de 3-tanques es similar (dentro de la incertidumbre paramétrica y experimental) a la obtenida con simulaciones numéricas de EDPs con mallas densas Di Blasi (2000). En particular, las predicciones de la velocidad de producción y el poder calórico del gas de síntesis obtenidas con el modelo de 3-tanques capturan con precisión las respues-

Tabla 6.2: Comparación de resultados entre estudios de modelado y experimentales.

Variable	Experimental * ²	Modelo con DF de 500 nodos * ³	Modelo 2D CFD * ⁴	Modelo 3-RCTAs (Este trabajo)
% $X_{CO,N}$	17 – 18	18.5 – 20.3	20 – 28	18.4
% $X_{H_2,N}$	11 – 13.5	9.8 – 16.8	5.56 – 10	12.8
% $X_{CO_2,N}$	11 – 13	9.4 – 15.3	9.78 – 10.75	14
% $X_{CH_4,N}$	--	2.4 – 4.5	4 – 7	3.5
% $X_{H_2O,N}$	--	8.8	10.5 – 11	8
% $X_{N_2,N}$	45 – 55	43 – 60	46.9 – 47.2	43.5
$T_{g,N}(K)$	837	810 – 942	741	900
$\dot{m}_{g,N} (kg/h)$	--	44	--	43.25
LHV/HHV * ¹	--	5.07/5.48	6.59/7.19	4.61/5.0

*¹ (MJ/Nm^3) Condición Normal: $T_g = 293.15K$, $P = 101.325kPa$

*² (Manurung y Beenackers, 1993) (Experimental)

*³ (Di Blasi, 2000) (Simulación)

*⁴ (Rogel, 2007) (Simulación)

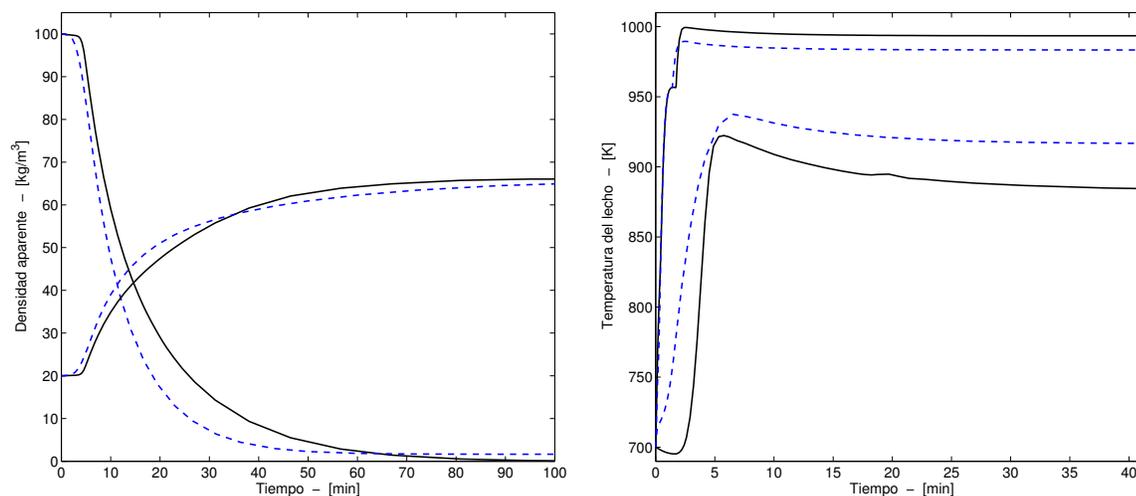


Figura 6.4: Respuestas transitorias de las densidades de biomasa y carbonizado de efluentes (izquierda), así como de la temperatura de salida y máxima (derecha) de los modelos de 3-RCTAs (gráfica punteada) y de 12-RCTAs (gráfica sólida).

tas correspondientes del modelo de 12-tanques, o equivalentemente, aquellas obtenidas en estudios previos con simulaciones numéricas de EDPs.

Resulta importante enfatizar que la desviación significativa que ocurre en el perfil temporal de la temperatura a la salida del reactor del modelo de baja dimensión (3-RCTAs) con respecto al logrado con el de 12-RCTAs (figura 6.4b) afecta considerablemente la precisión

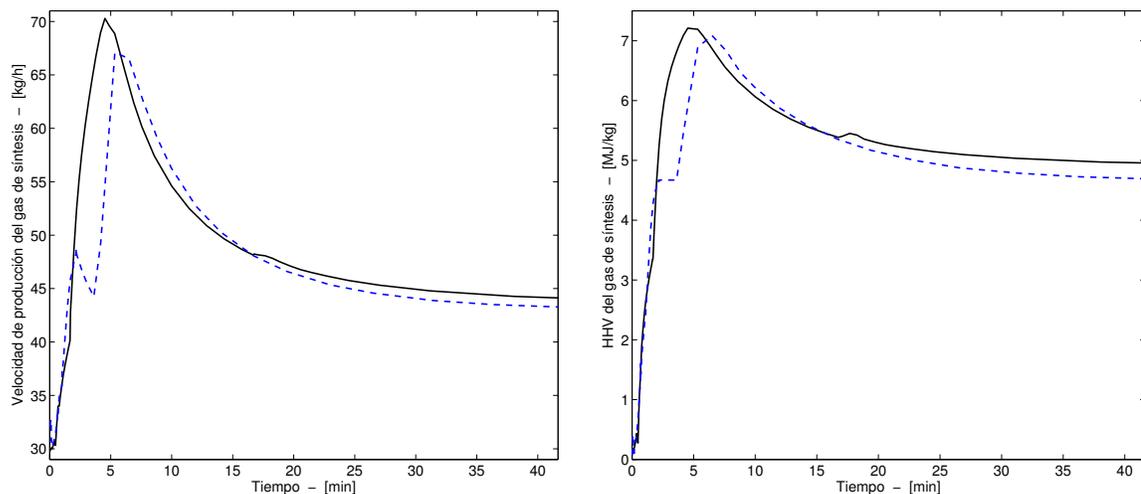


Figura 6.5: Respuestas transitorias de la velocidad de producción y valor calórico alto del gas de síntesis correspondientes a los modelos de 3-RCTAs (gráfica punteada) y de 12-RCTAs (gráfica sólida).

del comportamiento de los componentes gaseosos (figura 6.6) y del valor calórico del producto (figura 6.5b). La principal razón de esta desviación es la discretización simplificada de las condiciones de frontera de von Neumann a la salida del reactor (6.9v).

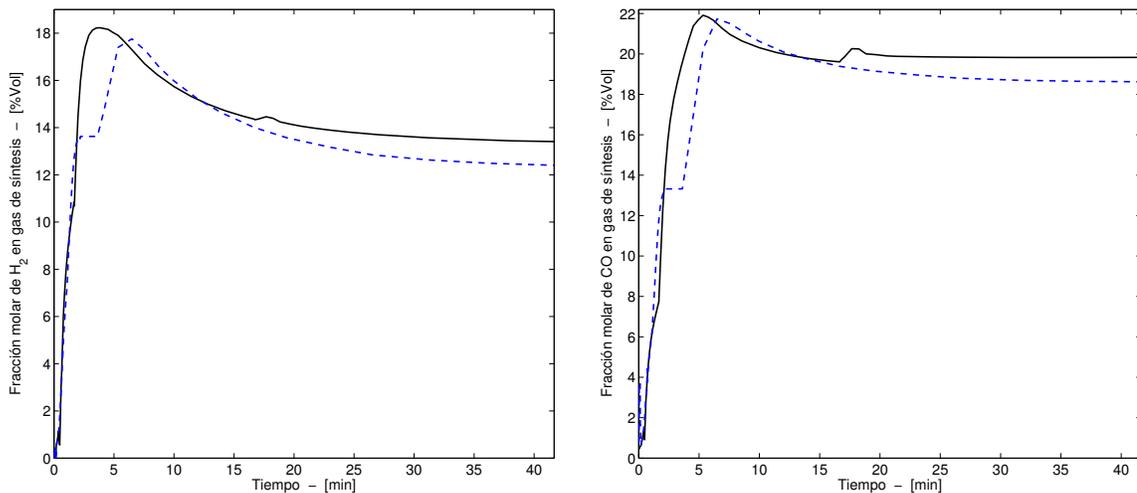


Figura 6.6: Respuestas transitorias de las fracciones molares de H_2 y CO en el gas de síntesis correspondientes a los modelos de 3-RCTAs (gráfica punteada) y de 12-RCTAs (gráfica sólida).

En resumen, las predicciones producidas por el modelo de 3-RCTAs poseen desviaciones

(menores a 15 %) similares a las obtenidas con estudios de simulación numéricos del modelo en EDPs del gasificador, los cuales son sistemas dinámicos de dimensión finita alta y computacionalmente intensivos. Finalmente, en la tabla 6.1 se presenta una comparación entre las principales características del modelo de 3-RCTAs de baja dimensión ($M = 9$ EDOs) y de los modelos subyacentes de estudios previos de simulación. De acuerdo a la tabla 6.1 en conjunción con la tabla 6.2 el esquema de diseño de modelo propuesto es considerablemente más simple en términos del número de EDOs y la interpretación física del mismo.

En la presente sección se ha ilustrado la efectividad del método de diseño de modelo para capturar el comportamiento dinámico y estático local del gasificador de biomasa, es decir, en una vecindad alrededor de un estado estacionario de relevancia operacional (reacción estabilizada en la cima). En vista de la evidencia del comportamiento fuertemente no lineal (Amundson y Arri, 1978) en gasificadores de carbón de flujos en contracorriente, resulta necesario abordar el problema de estabilidad y multiplicidad de estados estacionarios en el reactor de biomasa. Dicho estudio no ha sido realizado de forma sistemática para reactores de flujos paralelos de biomasa debido a la complejidad de los modelos existentes. De esta manera, el objetivo del próximo capítulo consiste en evaluar la capacidad del modelo de N -RCTAs de dimensión reducida para capturar el comportamiento no local en estados estacionarios de operación diversos de relevancia física para el gasificador de biomasa del caso de estudio, ya que permite la descripción y predicción de los siguientes aspectos:

1. Dinámica de encendido y apagado del reactor. Existen pocos estudios que proporcionen información sobre el transitorio de encendido y apagado del proceso. Shwe (2004) estudia la dinámica de cuatro métodos generales de encendido en el caso de un gasificador de biomasa de baja escala (20.6 cm de diámetro interno y 70 cm de altura con cubos de 2 cm y densidad de 950 kg/m^3):
 - a) Ignición de biomasa seca. Establecer mediante una antorcha de propano una zona de combustión de biomasa capaz de proveer el calor necesario para que se desarrolle la gasificación. El tiempo de encendido es de más de una hora y el gas de síntesis contiene una concentración alta de alquitranes.
 - b) Ignición con un lecho de carbón de altura mínima. Se produce una combustión similar al método anterior. El transitorio dura de 15 a 20 minutos y la concentración de alquitranes en el gas de síntesis se reduce a un valor aceptable para su uso en motores de combustión.
 - c) Generación de un lecho de carbón mediante pirólisis lenta. Se produce un lecho de carbonizado de altura deseada dosificando un bajo flujo de aire para que domine la pirólisis. Una vez alcanzado el nivel de carbonizado se incrementa el flujo de aire para que domine la gasificación, aprovechando la característica de onda viajera del frente de reacción. El tiempo característico del transitorio es mayor al primer método.
 - d) Rediseño por etapas del reactor. El reactor es dividido en dos etapas principales: pirólisis y gasificación. Por lo que se garantiza que la zona de reducción

se establezca con menores tiempos de encendido y menores concentraciones de alquitranes en el gas de síntesis.

2. Transitorio de operación generado por cambios en la demanda de gas de síntesis. En aplicaciones de generación de energía mecánica eléctrica o calórica cambios en la potencia de salida requerida son comunes por lo que resulta indispensable reducir el largo tiempo de respuesta en lazo abierto del gasificador Gobel *et al.* (2007).

Capítulo 7

Estudio del comportamiento no lineal.

En esta sección se lleva a cabo un estudio de la estabilidad y el comportamiento dinámico no lineal del reactor de gasificación de biomasa (sección 2.7) bajo diversas condiciones de operación, utilizando el método de diseño de modelo propuesto. Específicamente se analiza la influencia de los flujos entrantes de aire y biomasa (q_e^g, q_e^s) en la respuesta transitoria y en estado estacionario del reactor con el objetivo de diseñar un modelo de la dimensión más baja posible capaz de capturar el comportamiento esencial no lineal del sistema de gasificación en las distintas circunstancias de operación a la luz de la incertidumbre de modelado y experimental de estudios previos. En particular, el presente estudio toma en cuenta la incertidumbre significativa presente en el parámetro de dispersión térmica (D_H) por tres razones fundamentales:

- El submodelo de la conductividad térmica efectiva utilizado en el caso de estudio corresponde a un bajo valor del coeficiente de dispersión térmica en relación a la velocidad de flujo advectiva de calor, es decir, un número de Peclet térmico alto ($\mathcal{D}_H = 0.454mm^2/s$ y $Pe_H = 86.5$ en ecuaciones 6.4 y 6.5) en relación al valor típico reportado para reactores similares.
- Modelos distribuidos en los que se combinan un número de Peclet alto y una reacción fuertemente exotérmica (combustión) exhiben un comportamiento estático y dinámico no lineal sin relevancia física (frentes de reacción estabilizados en un número infinito de posiciones axiales) que se manifiesta en la dependencia del número de estados estacionarios con el número de tanques (N) del modelo de N -RCTAs (Varma, 1980).
- Existen discrepancias en los estudios de modelado previos (Hobbs *et al.*, 1992), (Di Blasi, 2000), (Shwe, 2004) en cuanto a la diversidad de mecanismos de transporte de calor del lecho empacado que se deben incluir en la conductividad térmica efectiva.

Dichas consideraciones motivaron la realización de un estudio de revisión y caracterización del coeficiente de dispersión térmico (o número de Peclet térmico) y de los parámetros

de la cinética y entalpía de reacción de los procesos principales (pirólisis, combustión y reducción de carbón) desarrollados en reactores de gasificación de biomasa como parte de la tesis de maestría de García Anaya (2014). Dicho estudio muestra que un valor típico de $Pe_H = 2.6$ se presenta en un lecho empacado de biomasa tomando en cuenta 7 mecanismos de transporte de calor en la conductividad térmica efectiva del sólido y gas, entre los que destacan la radiación y conducción entre partículas vecinas.

En consecuencia, el presente estudio se basa en la caracterización de la dispersión térmica realizado por García Anaya (2014) para capturar el comportamiento no lineal del reactor de biomasa incrementando la conductividad térmica efectiva del lecho empacado del caso de estudio consecuentemente para obtener valores cercanos de $Pe_H = 2.6$ mediante un factor constante.

El fundamento metodológico del presente análisis no lineal está basado en el estudio de Najera (2012) realizado para un reactor tubular exotérmico de una fase y una componente química (modelo distribuido de dispersión de 2 EDPs) en el cual se establece que con un modelo de 3-RCTAs de idéntico volumen es posible:

1. Reproducir la multiplicidad y estabilidad de los 5 estados estacionarios que exhibe el mapa de bifurcación del reactor tubular con respecto a la temperatura de la camisa de enfriamiento.
2. Facilitar el diseño de una estrategia de colocación de un sensor de temperatura a lo largo del reactor tubular para control y monitoreo.
3. Diseñar una ley de control no lineal robusta y estabilizante basada en pasividad y un controlador PI de la temperatura en la zona de máximo cambio en el perfil de temperatura axial.

La teoría de bifurcación de sistemas dinámicos no lineales constituye la base conceptual del análisis sistemático del comportamiento no local del gasificador de biomasa realizado en esta sección. Es por ello que primero se aborda el problema de analizar la estabilidad y el desempeño dinámico de gasificadores ante cambios en las condiciones de operación basado en nociones fundamentales de dicha teoría. Posteriormente, se realiza un análisis de bifurcaciones del efecto del flujo de alimentación de aire (q_e^g, q_e^s) en el comportamiento estático y dinámico del reactor de gasificación biomasa mediante el esquema de modelado de N -RCTAs, utilizando el nivel de dispersión térmica (o retro-mezclado q_k^b, H) correspondiente a la conductividad térmica efectiva del caso de estudio (2.14)-(2.15). Finalmente, se dilucida la estructura del comportamiento no lineal del reactor de biomasa al incrementar la conductividad térmica efectiva del lecho empacado de acuerdo a la caracterización racional realizada por García Anaya (2014). y de dispersión

7.1. Teoría de estabilidad en gasificadores.

Un diseño efectivo de un sistema de gasificación debe garantizar la operación óptima y estable del proceso bajo condiciones externas cambiantes. Desde el punto de vista de

la teoría de sistemas dinámicos de dimensión finita el concepto de estabilidad estructural en el sentido de Andronov sirve a estos propósitos, la cual implica una preservación de la estabilidad de un estado estacionario (EE) del proceso (un conjunto de perfiles espaciales axiales de concentraciones y temperaturas del reactor) ante variaciones de parámetros del sistema en un rango de valores pequeño.

La idea subyacente de la teoría de la estabilidad de sistemas dinámicos (desde Lyapunov, Andronov hasta Smale) consiste en determinar propiedades cualitativas, las cuales determinan la esencia misma (estructura) de la evolución de su respuesta ante cambios pequeños en los parámetros (sensibilidad de parámetros). El énfasis en el comportamiento cualitativo del sistema se debe a que en términos prácticos no es posible conocer de forma exacta el modelo que gobierna la evolución del sistema dinámico por diversas razones: incertidumbre paramétrica, dinámicas rápidas despreciadas en modelo reducido por hipótesis de estado cuasi-estacionario, suposiciones simplificadoras de modelado, etc. Entre las características cualitativas del comportamiento de los sistemas dinámicos se encuentran los estados estacionarios y las órbitas periódicas o ciclos límites, los cuales son los conjuntos invariantes más simples que determinan la topología de las soluciones del sistema en el espacio de estados.

El reactor de gasificación puede exhibir un comportamiento en estado estacionario cualitativamente diferente ante cambios pequeños en los parámetros de alimentación. Dicho sistema se dice que es estructuralmente inestable y el cambio cualitativo en su comportamiento se conoce como bifurcación. De esta manera un análisis formal de bifurcaciones consiste en determinar cuales son los patrones de cambio (tipo de bifurcación) de los estados estacionarios en un sistema dinámico ante variaciones de parámetros. En lo sucesivo se presentan las nociones básicas del análisis basado en bifurcaciones de sistemas dinámicos de dimensión finita aplicadas al modelo dinámico reducido de N -RCTAs en la forma de sistema de procesos por etapas (6.7).

El punto de partida del análisis de bifurcaciones es el modelo dinámico no lineal de dimensión reducida del gasificador (6.7), el cual se reescribe en forma compacta a continuación:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha), \quad \mathbf{x}, \mathbf{f} \in \mathbb{R}^M, \quad \alpha \in \mathbb{R} \quad (7.1)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{h}(\mathbf{x}, \alpha), \quad \mathbf{y}, \mathbf{h} \in \mathbb{R}^{Nv} \quad (7.2)$$

$$\mathbf{x} = [\mathbf{x}_1^T, \mathbf{x}_2^T, \dots, \mathbf{x}_N^T]^T, \quad \mathbf{y} = [\mathbf{y}_1^T, \mathbf{y}_2^T, \dots, \mathbf{y}_N^T]^T \quad (7.3)$$

$$\mathbf{x}_j = [\mathbf{w}_{s,j}^T, \mathbf{e}_{s,j}^T, \eta_j]^T, \quad \mathbf{y}_j = [\mathbf{w}_{g,j}^T, \mathbf{e}_{g,j}^T]^T, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (7.4)$$

donde \mathbf{x} es el vector de las M variables de estado del modelo (concentraciones de la fase sólida y temperatura a lo largo del reactor), \mathbf{y} es el vector de las variables en estado cuasi-estacionario (concentraciones de la fase gas en las N etapas a lo largo del gasificador) en función de los estados del sistema \mathbf{x} y α , el parámetro del sistema con respecto al cual se investiga la dependencia de la existencia y estabilidad de los estados estacionarios.

Un primer objetivo del análisis de esta sección consiste en determinar la influencia del parámetro perturbado α en el comportamiento estático del sistema mediante un mapa de

bifurcación, el cual también evidencia la sensibilidad de los estados \mathbf{x} con respecto a dicho parámetro. El estado estacionario del modelo del gasificador está dado por el conjunto de ecuaciones algebraicas no lineales siguientes:

$$0 = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha), \quad \mathbf{x}, \mathbf{f} \in \mathbb{R}^M, \quad \alpha \in \mathbb{R} \quad (7.5)$$

donde las r soluciones \mathbf{x} a dicho sistema de M ecuaciones algebraicas no lineales constituyen los r estados estacionarios del modelo en función del parámetro α :

$$\mathbf{x}_j^{EE} = \mathbf{g}(\alpha), \quad \mathbf{x}_j^{EE}, \mathbf{g} \in \mathbb{R}^M, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad j = 1, 2, 3, \dots, r \quad (7.6)$$

Por lo tanto, la expresión (7.6) define un conjunto de r funciones vectoriales de variable independiente real α cuya representación geométrica es un conjunto de curvas en el espacio \mathbb{R}^{M+1} , las cuales definen la influencia del parámetro α en el comportamiento a largo plazo del gasificador, determinado por la estabilidad de cada estado estacionario.

Cada una de las curvas de equilibrio del modelo está definida para un conjunto de valores de α ($[\alpha_j^l, \alpha_j^u]$ para cada curva) por lo que es probable que algunos estados estacionarios sólo existan en un intervalo del dominio. En los puntos α_j^l, α_j^u ocurre un cambio en la estabilidad del estado estacionario por lo que éstos son puntos de bifurcación de la curva.

El comportamiento dinámico local de las trayectorias del modelo alrededor de los estados estacionarios \mathbf{x}_j^{EE} está determinado por los M eigenvalores λ_i del Jacobiano del modelo $J(\mathbf{x}, \alpha) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}$ por lo que los métodos de análisis formal emplean funciones de prueba de estos eigenvalores, las cuales detectan cambios en la estabilidad del estado estacionario al variar el parámetro α y determinan el tipo de bifurcación que se presenta (Kuznetsov, 1998).

El presente estudio sólo se enfoca en la detección de los dos tipos de bifurcaciones de mayor interés en ingeniería de procesos:

1. *Bifurcación nodo-silla o punto límite.* Un estado estacionario tipo nodo estable (todos los eigenvalores de la matriz jacobiana son estables y reales) evoluciona a un tipo silla (al menos un eigenvalor de la matriz jacobiana es inestable y real y el resto estables y reales.). Genera multiplicidad de estados estacionarios. El punto de bifurcación ocurre cuando algún $\lambda_i = 0$.
2. *Bifurcación de Hopf.* Un estado estacionario tipo foco estable se vuelve inestable y se genera un ciclo límite (oscilación periódica persistente). El punto de bifurcación ocurre cuando alguna pareja $\lambda_{i,j} = \pm j\omega_i$.

En consecuencia, un análisis de bifurcaciones provee información acerca de los cambios cualitativos que ocurren en el comportamiento tanto dinámico como en estado estacionario al variar un conjunto de parámetros del sistema dinámico. El resultado de dicho análisis se presenta en un diagrama de bifurcación, en el que se grafican las curvas de estados estacionarios, su estabilidad y los puntos de bifurcación que se producen al variar uno o un conjunto de parámetros del sistema.

Los esquemas de continuación son métodos de análisis numérico que obtienen las curvas de los estados estacionarios, determinan su estabilidad y detectan los puntos de dichas curvas donde ocurren bifurcaciones con base en los eigenvalores de la matriz Jacobiana del sistema dinámico.

Pocos estudios realizan una caracterización de la dependencia de los estados estacionarios de reactores de gasificación respecto a parámetros de entrada. (Amundson y Arri, 1978), (Caram y Fuentes, 1982) encontraron cuatro conjuntos de perfiles de estado estacionario en un rango de valores de los flujos de sólido entrante para un gasificador de flujos en contracorriente presurizado (Lurgi).

Debido al papel fundamental que juega la estabilidad en la operación de un gasificador resulta necesario realizar un estudio del efecto que tienen los parámetros del modelo en el número y estabilidad de los estados estacionarios del gasificador de lecho empacado de biomasa de flujos paralelos. La simplicidad del modelo de N -RCTAs de orden reducido hace posible dicho análisis no local del comportamiento estático y dinámico del reactor de gasificación, dada la capacidad de descripción del modelo de 3-RCTAs demostrada en la sección anterior. En el presente proyecto de investigación se exploran dos métodos sistemáticos para la obtención de la curva de estados estacionarios en función del parámetro de entrada:

1. Variación en dos direcciones del parámetro de bifurcación. Método simple para detectar un fenómeno de histéresis y en consecuencia la multiplicidad de estados estacionarios. Los pasos del método son:
 - a)* Encontrar el estado estacionario correspondiente a un valor del parámetro mediante simulaciones temporales (problema de condiciones iniciales) o solución de ecuaciones algebraicas.
 - b)* Aumentar el parámetro hasta alcanzar un límite superior realizable y repetir el paso anterior.
 - c)* Disminuir el parámetro a partir del límite superior alcanzado y realizar el paso 1.
 - d)* Disminuir el parámetro hasta llegar a un límite inferior realizable y repetir el paso 1.

2. Análisis no local del comportamiento estacionario del gasificador. Se emplean métodos de continuación de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (modelo en parámetros concentrados). Existen una gran diversidad de implementaciones de los métodos de continuación pero dos de ellos destacan por su flexibilidad y eficiencia: MATCONT y AUTO.

El primer método provee una gráfica cualitativa de la variación del estado estacionario con respecto a un parámetro del sistema, mientras que el segundo obtiene una gráfica detallada de la dependencia de los estados estacionarios, su estabilidad y tipos de bifurcaciones con relación a un parámetro.

Con el objetivo de evaluar la capacidad de descripción de los modelos de N -RCTAs de orden reducido diseñados en esta tesis con relación a los modelos de alto orden de estudios previos se seleccionan como parámetros de bifurcación a los flujos alimentados de reactantes (biomasa y aire), en el entendido de que, en ausencia de un estudio sistemático de estabilidad y bifurcaciones para el gasificador de biomasa en la literatura, sólo se realizan comparaciones con estudios de sensibilidad paramétrica previos. En dicho análisis se considera la incertidumbre del parámetro de dispersión térmica del modelo.

En las siguientes dos secciones se investiga la influencia de variaciones en dos parámetros del sistema: flujo de aire entrante y al coeficiente de dispersión de calor en el comportamiento dinámico y estático no local de diversos modelos de N -RCTAs del gasificador de biomasa. El análisis del comportamiento no local de varios trenes de N -RCTAs es equivalente a estudiar el efecto del parámetro de discretización de número de nodos o elementos de la malla espacial $N_z = N + 1$ de las soluciones del modelo distribuido en EDPs discretizado espacialmente del gasificador de lecho empacado. Dicho análisis se basa en simulaciones transitorias y mapas de bifurcación obtenidos con el integrador numérico ode15s y el toolbox MATCONT de Matlab respectivamente.

7.2. Análisis no lineal nominal del reactor de biomasa.

La influencia de los flujos de los reactantes alimentados en el desempeño de gasificadores de lecho móvil ha sido ampliamente estudiado con énfasis en el análisis en estado estacionario para diseño de operación y equipo del proceso (Reed y Markson, 1985), (Di Blasi, 2000), (Barrio *et al.*, 2001), y para control y optimización (Amundson y Arri, 1978), (Caram y Fuentes, 1982). El efecto de los flujos alimentados de aire y de combustible sólido en el comportamiento dinámico ha sido abordado en el contexto de la operación dinámica con transitorios inducidos por cambios en la carga para aplicaciones de generación de energía (Gobel *et al.*, 2007), y para el diseño de una estrategia de encendido y apagado con producción mínima de alquitranes en un gasificador de biomasa de flujos paralelos (Shwe, 2004).

El esquema de diseño del modelo de N -RCTAs propuesto en esta tesis se utiliza en esta sección para investigar el efecto del flujo de aire alimentado en el desempeño estático y dinámico del reactor de gasificación de biomasa del caso de estudio. Es decir, el propósito de modelado perseguido en este segmento consiste en capturar los aspectos cualitativos del comportamiento no local del gasificador de biomasa, los cuales son caracterizados por el análisis de bifurcaciones. Para ello, se obtienen los diagramas de bifurcación con respecto al flujo de aire entrante para un conjunto de modelos de N -RCTAs diseñados.

Con el propósito de diseñar un modelo lo más simple (de la menor dimensión M) posible capaz de capturar los aspectos cualitativos del comportamiento no local del gasificador de biomasa, se obtienen los diagramas de bifurcación generados al variar dos parámetros del modelo de N -RCTAs: (i) el flujo de aire entrante, y (ii) el número N de tanques.

Los diagramas presentados en esta sección son obtenidos con los parámetros de referencia

del modelo para el reactor de biomasa tomados de (Badillo-Hernández, 2009), manteniendo el flujo de sólido alimentado constante en un valor de 9kg/hr y variando el flujo de aire entrante.

El análisis no lineal realizado en esta sección es nominal en el sentido de que no considera la incertidumbre del parámetro de dispersión térmica y se enfoca en elucidar el efecto del flujo de aire entrante en el comportamiento estático del reactor de biomasa.

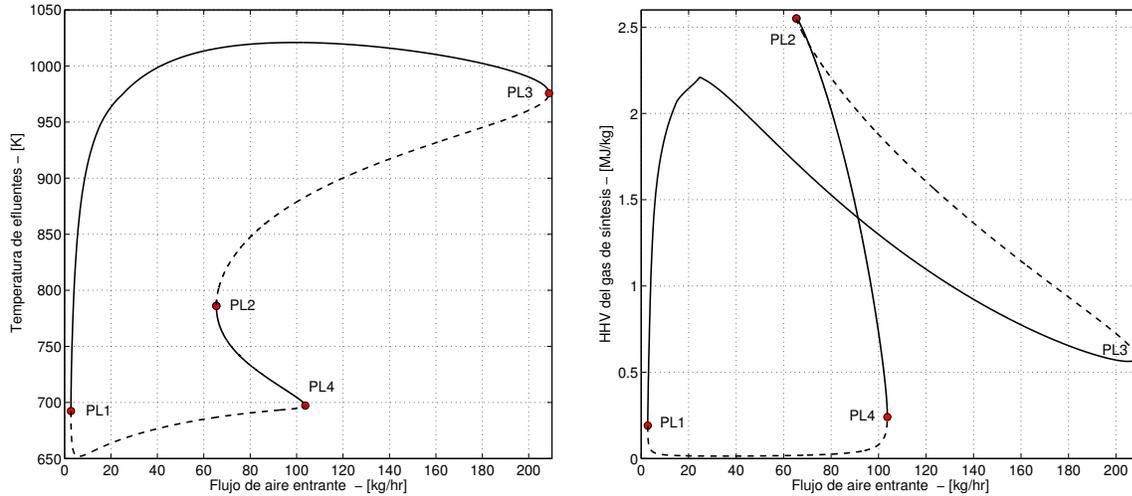


Figura 7.1: Diagramas de bifurcación de la temperatura (izquierda) y el valor calórico alto (derecha) del gas de síntesis efluente con respecto al flujo de aire entrante del modelo de 1-RCTA.

La figura 7.1 muestra las gráficas de las curvas de EEs del modelo de $N = 1$ -RCTA para la temperatura y poder calórico alto del gas de síntesis a la salida del reactor generadas a partir de la variación del parámetro de flujo de aire entrante. Debido a su simplicidad, se ha omitido la curva correspondiente al EE trivial de extinción o de flujo de las dos fases sin reacción ni calentamiento, la cual es una rama estable que consta de una recta horizontal a 300K en la gráfica de temperatura y a 0MJ/kg en la gráfica de valor calórico. Por lo tanto, el diagrama de bifurcación consiste en dos curvas desconectadas: (i) la curva del EE de extinción y (ii) una isola (curva cerrada) conformada por dos curvas de EE: una rama estable (línea sólida) y una rama inestable (línea punteada), las cuales se conectan en un punto de bifurcación de tipo nodo-silla $PL1$ en la zona de bajo flujo de aire. El comportamiento exhibido por la isola en el intervalo de flujos de aire altos ($> 60\text{kg/hr}$) es de una complejidad mayor debido a que existen 3 puntos límites ($PL2$, $PL3$ y $PL4$) y hasta 4 ramas de EE (2 estables y 2 inestables) incrementando la multiplicidad de EEs de 3 a 5 en el intervalo de flujos de aire definido por $PL2$ y $PL4$. El punto tangente $PL1$ de bajo flujo de aire se debe a que la cantidad de calor producido por la reacción exotérmica resulta insuficiente (por la deficiencia del comburente) para sostener la temperatura del lecho a la temperatura de ignición, en relación con el transporte de energía por convección y dispersión,

haciendo que el proceso se extinga eventualmente. En cambio, la presencia de los puntos límites extremos de la isola en el intervalo de alto flujo de aire $PL3$ y $PL4$ no se explica por deficiencias de generación y transporte de calor sino por limitaciones de transferencia de masa. Al incrementar el flujo de aire entrante en valores cercanos a los puntos límites $PL3$ y $PL4$ la velocidad de reacción de la combustión de carbonizado se encuentra limitada por la difusión del oxígeno hacia la superficie de la partícula (dado por el coeficiente de transporte de masa entre fases k_m), mientras que la velocidad de flujo del gas aumenta de forma proporcional al aumento de flujo de aire, de forma que el número de Damköhler de combustión se reduce (por la disminución del tiempo de residencia promedio del oxígeno y el valor relativamente constante del tiempo de reacción) y en consecuencia, la conversión de carbonizado por combustión decae hasta proveer un calor tan bajo que provoca la extinción del proceso.

En resumen, si el proceso de gasificación se llevara a cabo en un RCTA con mezclado perfecto el reactor exhibiría un mapa de bifurcación de flujo de aire entrante con estructura de 1-3-5-3-1 EEs y la región de operación de interés práctico (flujos de aire de 13.5 a 22.5 kg/hr) estaría en un intervalo de multiplicidad de 3 EEs con uno de ellos inestable caracterizado por conversión baja de biomasa, uno estable de extinción y uno estable de encendido con conversión intermedia de biomasa.

En las figuras 7.2-7.3 se muestran los diagramas de bifurcación generados al variar el parámetro de flujo de aire alimentado en varios modelos de N -RCTAs para el gasificador de biomasa del caso de estudio en el intervalo de flujos de aire de interés práctico (de 0 a 22.5 kg/hr). Para facilitar la visualización de las gráficas, se omite la curva del EE trivial de extinción total del proceso termo-químico en todos los diagramas presentados. Los modelos de $N = 2$, $N = 3$ y $N = 5$ RCTAs muestran diagramas de bifurcación con características en común con el modelo de 1-RCTA: la curva de EE de extinción, los dos EEs (estable e inestable) que conforman la isola de menor HHV. A la luz de esta comparación es posible afirmar que los trenes de $N = 2$, $N = 3$ y $N = 5$ tanques agregan 2, 4 y 8 EEs de mayor conversión (o gas de síntesis de mayor HHV) que forman 1, 2 y 4 isolas con puntos de bifurcación ubicados en el intervalo de bajo flujo de aire alimentado de 2 a 3 kg/hr .

Es importante señalar que utilizando únicamente el método de continuación no es posible construir todas las curvas de EEs de las isolas en las figuras 7.2-7.3 debido a que dichas curvas se encuentran desconectadas en los puntos donde se inicia la continuación (13.5 kg/hr de flujo de aire entrante). Es por ello que se fija el parámetro de flujo de aire entrante mientras se perturban las condiciones iniciales alrededor del EE encontrado con el método de continuación y se ejecutan varias simulaciones transitorias del modelo dinámico de N -RCTAs con ode15s hasta encontrar la región de atracción de un EE estable en otra curva desconectada de la curva de EE encontrada inicialmente con MATCONT.

En la tabla 7.1 se resumen las características de los diagramas de bifurcación en relación al comportamiento dinámico y estático de los diversos trenes de N -RCTAs. De acuerdo, a dicha tabla los puntos límite de cada diagrama de bifurcación tienen un orden ascendente en relación al HHV del gas de síntesis producido, es decir, la curva o rama del EE con mayor HHV tiene el punto límite más alto por lo que el intervalo de flujos de aire en el que éste

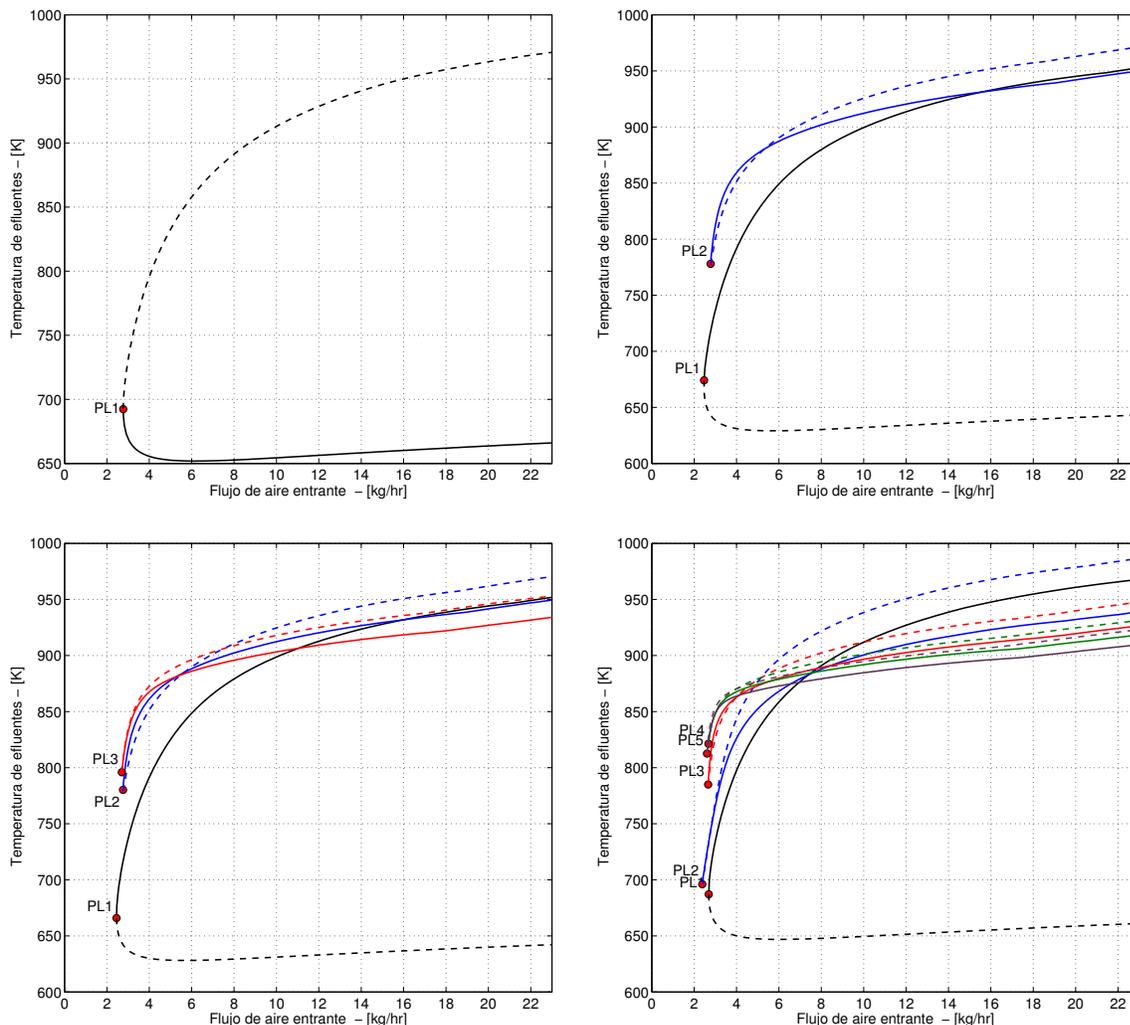


Figura 7.2: Diagramas de bifurcación de la temperatura del gas de síntesis efluente con respecto al flujo de aire entrante de los modelos de 1, 2, 3, 5-RCTAs de diferente volumen.

existe es menor al resto de los EEs.

La figura 7.4 muestra los perfiles espaciales de los 7 EEs posibles del modelo de $N = 3$ -RCTAs del gasificador de biomasa con flujos de alimentación de aire de 13.5 kg/hr y de biomasa de 9 kg/hr . Los 4 perfiles de EE estables (incluido el EE trivial de extinción en verde) se muestran con una gráfica sólida y los 3 perfiles de EE inestables tienen una gráfica de línea punteada. Los círculos en los perfiles de EE indican los valores calculados de las variables dependientes (concentraciones, temperatura, etc.) a lo largo de la malla espacial de discretización del reactor tubular. Los colores de los perfiles de EE corresponden a los colores de las curvas de EE a las que pertenecen en los diagramas de bifurcación del modelo de 3-RCTAs en las figuras 7.2-7.3. Las diferencias cualitativas de los perfiles de EEs son la

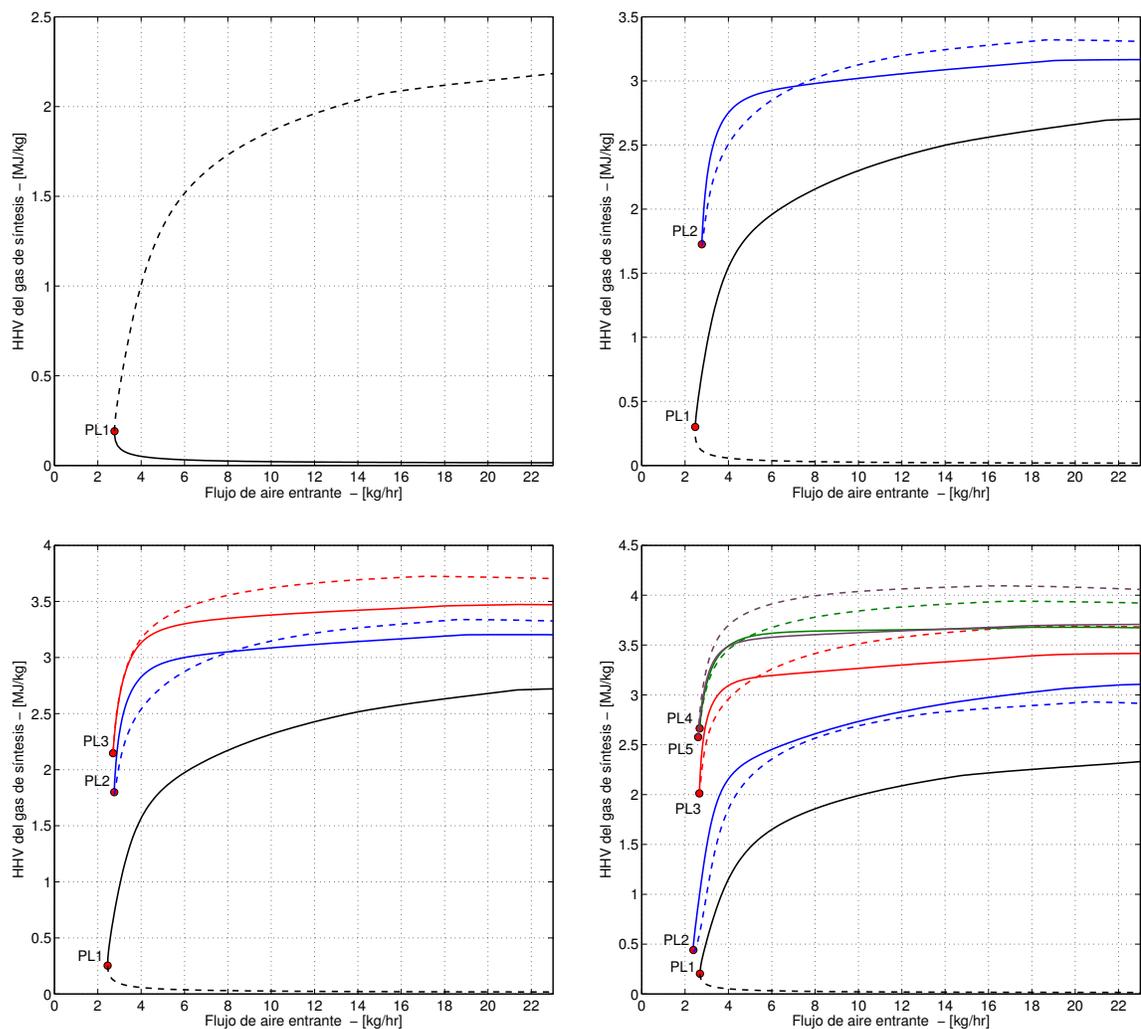


Figura 7.3: Diagramas de bifurcación del poder calórico HHV del gas de síntesis con respecto al flujo de aire entrante de los modelos de 1, 2, 3, 5-RCTAs de diferente volumen.

ubicación del frente de reacción, la conversión de biomasa, el valor HHV del gas de síntesis producido y la temperatura máxima alcanzada. Tales diferencias se deben a las distintas longitudes y ubicaciones axiales que ocupan las zonas de reacción en cada EE del gasificador. Un análisis similar aplica para los diferentes perfiles de EEs exhibido por los modelos de $N = 1, 2, 5$ -RCTAs, cuyas gráficas no se presentan por economía de espacio en el texto.

Al comparar el diagrama de bifurcación del modelo de $N = 1$ -RCTA con los obtenidos de trenes de $N = 2, 3, 5$ -RCTAs de las figuras 7.2-7.3 se observa que los diferentes EEs que aparecen cuando se agregan tanques al tren de gasificación corresponden a las diferentes configuraciones de encendido que son posibles en el reactor tubular mediante las reacciones exotérmicas de combustión (figura 7.4).

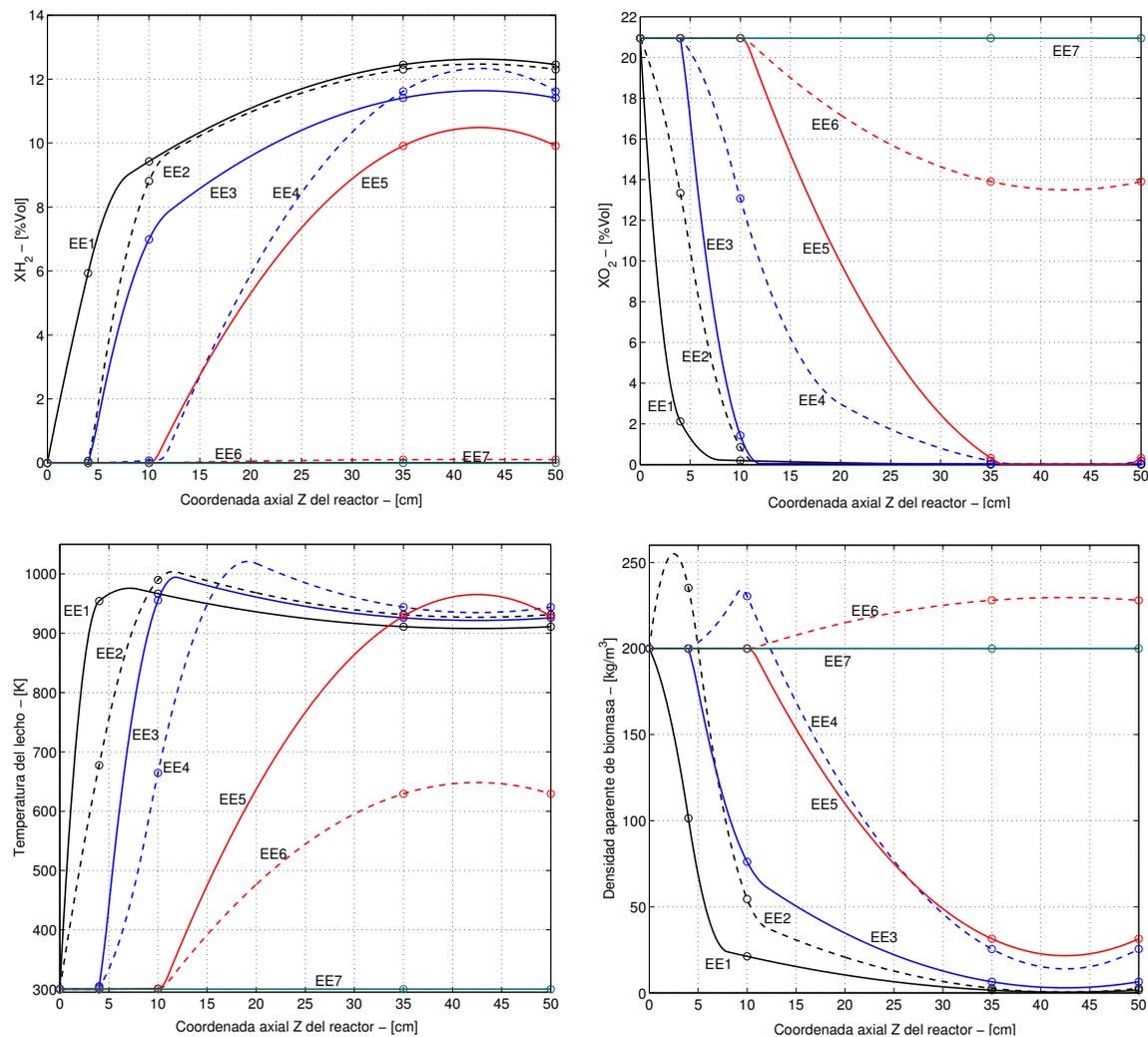


Figura 7.4: Los 7 perfiles de EE de algunas concentraciones del gas (H_2 y O_2), temperatura y densidad aparente de biomasa para el modelo de 3-RCTAs de diferente volumen con flujo de aire entrante de 13.5kg/hr .

Cabe mencionar que en dichas figuras y tablas no se presentan los puntos límites de alto flujo de aire de las islas debido a su poca relevancia desde el punto de vista práctico y a que las dificultades numéricas (sistemas de ecuaciones algebraicas mal condicionados) se acentúan significativamente al continuar las curvas de EEs (mediante MATCONT) fuera del intervalo de interés de flujos de aire del gasificador, haciendo dichas simulaciones numéricas computacionalmente intensivas. La presencia de dichos puntos de bifurcación se explica de la misma forma que los puntos límite de alto flujo ($PL3$ y $PL4$) del modelo de 1-RCTA del gasificador. Además, el valor de estos puntos tangentes se puede estimar mediante simulaciones numéricas transitorias utilizando el integrador ode15s de Matlab si es requerido.

Dichos resultados permiten inferir de forma inductiva las características del comportamiento no lineal del modelo generalizado de N -RCTAs para el caso de estudio:

Un tren de N -RCTAs de gasificación (con el conjunto de parámetros de referencia) exhibe un EE estable de extinción total y hasta $2N$ EEs con conversión de biomasa, de los cuales N son estables y N inestables. La región de máxima multiplicidad de EEs incluye el intervalo de operación de interés práctico (flujos de aire de 13.5 a 22.5 kg/hr) de acuerdo a el diagrama de bifurcación con respecto al flujo de aire entrante, el cual tiene una estructura compuesta por (i) una curva de EE de extinción total, y (ii) N isolas con conversión de biomasa, cada una de las cuales está formada por 2 curvas de EE: una estable y una inestable conectadas con un punto límite en la región de operación de baja relación de aire/biomasa alimentados.

En esta estructura generalizada del diagrama de bifurcación del modelo de N -RCTAs la curva del EE de extinción se encuentra desconectada de las $2N$ curvas de EEs con conversión de biomasa debido a la baja temperatura a la que ingresan los reactantes ($T_e = 300K$). Dicha desconexión evidencia que no es posible iniciar el proceso de gasificación (transitar del EE de extinción a uno de los $2N$ EEs de encendido) con sólo incrementar los flujos alimentados de reactantes con una temperatura entrante de $300K$. Sin embargo, la transición entre los diferentes EEs con conversión de biomasa es posible con flujos de aire en intervalos delimitados por los puntos límites y corresponde a un apagado progresivo e irreversible del reactor de gasificación por zonas. Es decir, si se disminuye el flujo de aire a un valor menor al punto límite correspondiente al EE en operación, el reactor transitará de forma irreversible a un EE que produce un gas de síntesis con menor HHV debido a que se extingue una región superior del lecho. Este comportamiento dinámico corresponde a un movimiento del frente de reacción unidireccional e irreversible hacia el fondo del reactor de biomasa por efecto de la disminución del flujo de aire alimentado. Debido a que, conforme se aumenta el número de RCTAs N , aumenta el número de EEs, se incrementan las ubicaciones posibles del frente de reacción estable. Esto significa que en el límite (cuando $N \rightarrow \infty$) habrá un continuo infinito de EEs y el frente de reacción se podrá estabilizar en cualquier ubicación axial a lo largo del reactor para cualquier valor de flujo entrante de biomasa y aire. Ambos fenómenos: el frente de reacción viajero unidireccional y el continuo infinito de EEs corresponden a un comportamiento sin relevancia física del modelo de N -RCTAs del gasificador de biomasa del caso de estudio utilizando el conjunto de parámetros de referencia. Dicho comportamiento espurio es analizado en varios estudios Yee y Sweby (1995), Lafon y Yee (1996a) desde el punto de vista de métodos numéricos y dinámica no lineal. En el Apéndice D se presenta un panorama general del análisis del comportamiento no lineal inducido por el método de discretización y la distribución de los nodos de la malla empleada.

Dichas características del comportamiento no lineal son verificadas con simulaciones transitorias de modelos de mayor orden, es decir, utilizando modelos de N -RCTAs con volumen idéntico y N en el intervalo $N = [1, 48]$. Por ejemplo, el modelo de 20 RCTAs exhibe 21 EEs estables correspondientes a las 20 configuraciones de encendido y a la solución de EE de extinción. Sin embargo, para modelos de más de 48 RCTAs la simulación numérica del modelo con integradores implícitos (ode15s,ode23t) presenta problemas de convergencia y cuando converge sólo lo hace al EE de extinción a pesar de proponer condiciones iniciales de

Tabla 7.1: Características de bifurcación de varios modelos de N -RCTAs.

Modelo de N -RCTAs diseñado con volúmenes normalizados (ec. 6.9q).	No. de EEs	EEs Estables	EEs Inestables	Puntos límites (kg/hr aire)
$N = 1$ $\mathcal{V}_1 = 1$	3	2	1	$PL1 = 2.428$
$N = 2$ $\mathcal{V}_1 = 0.2$, $\mathcal{V}_2 = 0.8$	5	3	2	$PL1 = 2.181$ $PL2 = 2.594$
$N = 3$ $\mathcal{V}_1 = 0.114$, $\mathcal{V}_2 = 0.171$, $\mathcal{V}_3 = 0.714$	7	4	3	$PL1 = 2.171$ $PL2 = 2.592$ $PL3 = 2.745$
$N = 5$ $\mathcal{V}_1 = \mathcal{V}_2 = 0.105$, $\mathcal{V}_3 = 0.184$, $\mathcal{V}_4 = 0.237$, $\mathcal{V}_5 = 0.368$	11	6	5	$PL1 = 2.326$ $PL2 = 2.436$ $PL3 = 2.514$ $PL4 = 2.746$ $PL5 = 2.719$

alta temperatura y conversión. Esto puede explicarse por la alta sensibilidad (mal condicionamiento) y rigidez introducida en el modelo por el efecto combinado de una malla espacial muy densa y la intensidad de las reacciones evidenciada por los números de Damköhler altos en las reacciones de combustión y pirólisis.

A pesar de que existe la posibilidad de encontrar un número mayor de EEs, $2N + 1$ debe ser considerado como un máximo conservativo, en vista del análisis de multiplicidad de EEs del modelo de N -RCTAs sin retro-mezclado para un reactor tubular exotérmico de una fase y una componente realizado por (Varma, 1980). El autor establece que el modelo de N -RCTAs en serie posee un número máximo a priori de $2^N - 1$ EEs, de los cuales sólo $N + 1$ son estables. Este máximo puede incrementarse para un modelo de N -RCTAs de un reactor catalítico de lecho empacado de dos fases con dispersión o retro-mezclado de calor bajos.

Los resultados sobre el comportamiento dinámico y estático del gasificador de biomasa provistas por el análisis de bifurcaciones son consistentes con el comportamiento encontrado por (Vanderveen *et al.*, 1968) para un modelo de celdas análogo al modelo de N -RCTAs de un reactor catalítico de lecho empacado de dos fases con una reacción fuertemente exotérmica. En dicho modelo, el autor observa un fenómeno de multiplicidad de un número infinito de EEs que se presenta también en reactores tubulares de dos fases sin dispersión (Liu y Amundson, 1962). La existencia de un continuo infinito de múltiples EEs entre un EE de alta temperatura y un EE de baja temperatura para el modelo distribuido de reactores de lecho empacado se explica por las siguientes razones: (i) cada partícula o celda a lo largo del lecho puede exhibir múltiples EEs, y (ii) la ausencia de intercambio de calor entre las partículas encendidas y las partículas apagadas (sin convertir) ubicadas atrás (o arriba) de ellas en la región espacial comprendida entre los EEs de alta y baja temperaturas (Eigenberger, 1972).

Tal multiplicidad implica que el frente de reacción discontinuo exotérmico puede estabilizarse en cualquier posición axial a lo largo del reactor para un flujo entrante constante de reactantes al variar las condiciones iniciales de la operación, un fenómeno que no se observa experimentalmente en reactores de lecho empacado autotérmicos donde siempre existe un

acoplamiento de calor importante entre las partículas .encendidasz todos sus vecinos (los de atrás y los de adelante) que se manifiesta como un retro-mezclado de calor entre la zona exotérmica de combustión y la zonas endotérmicas de pirólisis y reducción en el caso de los gasificadores.

Por otra parte, Eigenberger (1972) muestra que al incorporar un nivel suficiente de dispersión al modelo distribuido puramente convectivo de reactores de lecho empacado solucionará el problema de multiplicidad infinita de EEs tanto en el modelo distribuido de dispersión como en el modelo en parámetros concentrados de N -RCTAs.

Adicionalmente, la revisión de las ecuaciones constitutivas para la conductividad térmica efectiva del lecho realizada por García Anaya (2014) en la literatura de gasificadores de lecho empacado produjo diferencias significativas en los valores de la dispersión térmica calculados con dichas expresiones respecto al caso de estudio Di Blasi (2000), evidenciando la alta incertidumbre de modelado y experimental que predomina en relación a dicho parámetro en este tipo de reactores de gasificación en específico.

En vista de tales consideraciones y de la baja intensidad del transporte de calor por dispersión ($\mathcal{D}_H = 0.454mm^2/s$ y $Pe_H = 86.5$ en ecuaciones 6.4 y 6.5) debido a una baja conductividad térmica efectiva del lecho ($\lambda_0 = 0.7W/(mK)$) del modelo distribuido (6.1) del reactor de biomasa del caso de estudio (2.14)-(2.15) resulta fundamental realizar un análisis de bifurcaciones análogo al realizado en esta sección pero con una mayor dispersión térmica y retro-mezclado correspondientes al valor típico de conductividad térmica efectiva caracterizada por García Anaya (2014) para gasificadores de lecho empacado con el objetivo de descartar el comportamiento no lineal espurio o sin relevancia física identificado en la presente sección.

7.3. Caracterización del comportamiento no lineal.

En esta sección se aborda el problema de dilucidar propiedades fundamentales del comportamiento no lineal como la multiplicidad, estabilidad y bifurcación de estados estacionarios del gasificador de biomasa de flujos concurrentes del caso de estudio mediante el modelo de N -RCTAs con retro-mezclado tomando en cuenta la incertidumbre de modelado proveniente principalmente del parámetro de dispersión térmica D_H . Un análisis similar al llevado a cabo en la sección anterior incrementando la dispersión térmica y en consecuencia el retro-mezclado lleva a un diagrama de bifurcación con respecto al flujo de aire entrante de estructura (número de EEs, estabilidad y puntos de bifurcación) relevante físicamente de acuerdo a estudios previos. Cabe destacar que el incremento de la conductividad térmica en esta sección se realiza basado en el valor típico caracterizado por el estudio de García Anaya (2014) mediante un factor de corrección constante agregado a la ecuación constitutiva del caso de estudio, lo cual implica un incremento del coeficiente de dispersión de calor D_H en el modelo distribuido (6.1) y del retro-mezclado de calor q_H^b en el modelo de N -RCTAs concentrado (6.9), así como, la disminución del número de Peclet del sistema distribuido Pe_H .

De acuerdo a (Eigenberger, 1972) el comportamiento no lineal típico como la coexistencia de múltiples estados estacionarios exhibido por los reactores de lecho empacado (móvil y fijo) de dos fases bajo ciertas condiciones de operación (un conjunto de valores de los parámetros del sistema de procesos) se debe a dos fenómenos físicos:

1. El efecto de retroalimentación de energía que tiene el transporte de calor por dispersión en el modelo distribuido del reactor o el retro-mezclado de calor en el modelo de N -RCTAs, el cual implica siempre un flujo de calor en sentido contrario al movimiento o flujo del lecho empacado (van Heerden, 1958).
2. Los mecanismos de transporte de masa y energía intrapartícula y extrapartícula hacen posible que el frente de la flama de combustión en la partícula del sólido tenga multiplicidad de ubicaciones estables e inestables: dentro de ella o en la superficie de la partícula de carbonizado para una concentración de oxígeno y temperatura fijas en la atmósfera gaseosa que rodea a la partícula porosa (Arri y Amundson, 1978).

Por lo tanto, los modelos de gasificadores de lecho móvil deben capturar razonablemente bien estos fenómenos físicos para tratar los problemas de estabilidad de operación, encendido (ignición) y extinción del reactor asociados con su comportamiento dinámico global.

Los estudios de (Milligan, 1994; Shwe, 2004) reconocen la importancia que tiene el mecanismo de dispersión de calor para la estabilidad del proceso de gasificación de biomasa y atribuyen la intensidad de dicho fenómeno principalmente a la transferencia de calor por radiación de las partículas de carbonizado incandescentes en la zona de combustión hacia las partículas vecinas en las zonas de secado, pirólisis y de reducción en gasificadores de lecho empacado de biomasa con flujos descendentes. Sin embargo, la influencia de la dispersión en la estática y dinámica del proceso de gasificación de biomasa no ha sido analizada en términos de aspectos prácticos de operación como la estabilidad, el encendido y el apagado del reactor.

En este sentido, el presente estudio investiga mediante un análisis de bifurcaciones el papel que juega en la descripción del comportamiento estático y dinámico el nivel de retro-mezclado de calor en el modelo de N -RCTAs (6.9) o equivalentemente, la dispersión de calor en el modelo distribuido (6.1) discretizado del gasificador de biomasa de flujos paralelos descendentes

Las figuras 7.5-7.6 muestran los diagramas de bifurcación de temperatura y poder calórico del gas effluente en relación al flujo de aire alimentado de 4 trenes de N -RCTAs con $N = 1, 2, 3, 5$ y un coeficiente de dispersión térmica incrementado 50 veces con respecto al utilizado para generar los diagramas de las figuras 7.2-7.3 de la sección anterior, es decir, se utilizó un coeficiente $\mathcal{D}_H = 0.227\text{cm}^2/\text{s}$ (o número de Peclet $Pe_H = 1.72$) para los diagramas de esta sección. Se observa que el diagrama del caso de 1-RCTA no presenta un cambio significativo en su estructura con relación al de las gráficas correspondientes en las figuras 7.2-7.3 como es esperado ya que el retro-mezclado sólo sucede entre parejas de RCTAs. El cambio cualitativo importante se suscita en los diagramas de $N = 2, 3, 5$ -RCTAs donde se observa que en los tres casos se tienen 2 islas con conversión de biomasa (que producen gas

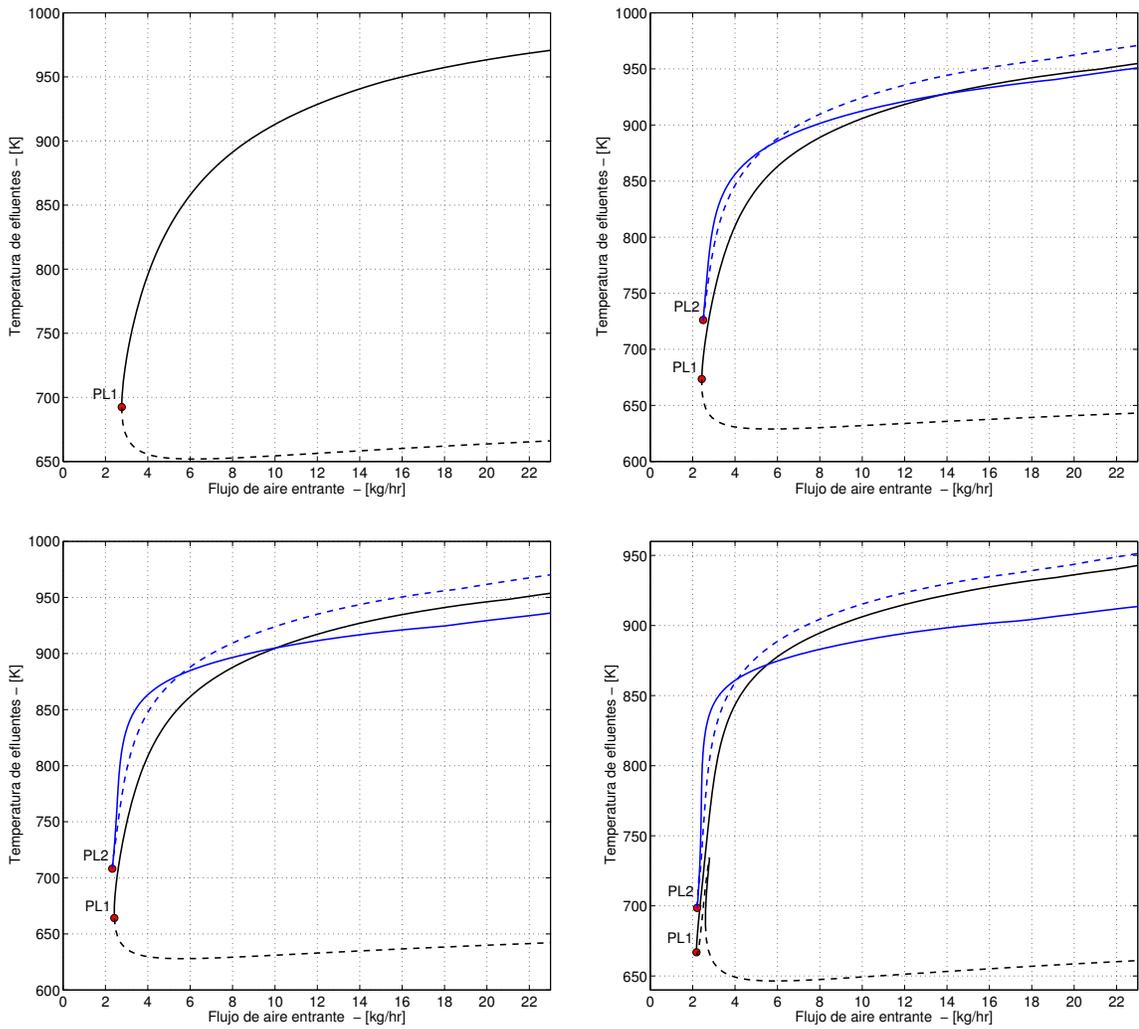


Figura 7.5: Diagramas de bifurcación de la temperatura del gas de síntesis efluente con respecto al flujo de aire entrante de los modelos de 1, 2, 3, 5-RCTAs de diferente volumen y dispersión de calor de $\mathcal{D}_H = 0.227\text{cm}^2/\text{s}$ y $Pe_H = 1.72$.

con HHV no cero) y la curva horizontal del EE de extinción. Por lo tanto, los tres trenes exhiben un mapa de bifurcación con una estructura de hasta 5 EEs, de los cuales 2 son inestables y 2 estables con producción de gas de síntesis y uno es estable y de extinción.

En la figura 7.7 se presentan los perfiles espaciales interpolados correspondientes a los 5 EEs que exhibe el modelo de 3-RCTAs del gasificador de biomasa con flujos entrantes de aire de 13.5kg/hr y de biomasa de 9kg/hr . Los perfiles estacionarios estables EE1 y EE3 corresponden a dos formas de operación en lazo abierto del reactor tubular de biomasa diferenciados por la posición del frente de reacción (uno cerca de la cima y el otro desplazado hacia el fondo del reactor), la conversión de biomasa, y el HHV del gas producido.

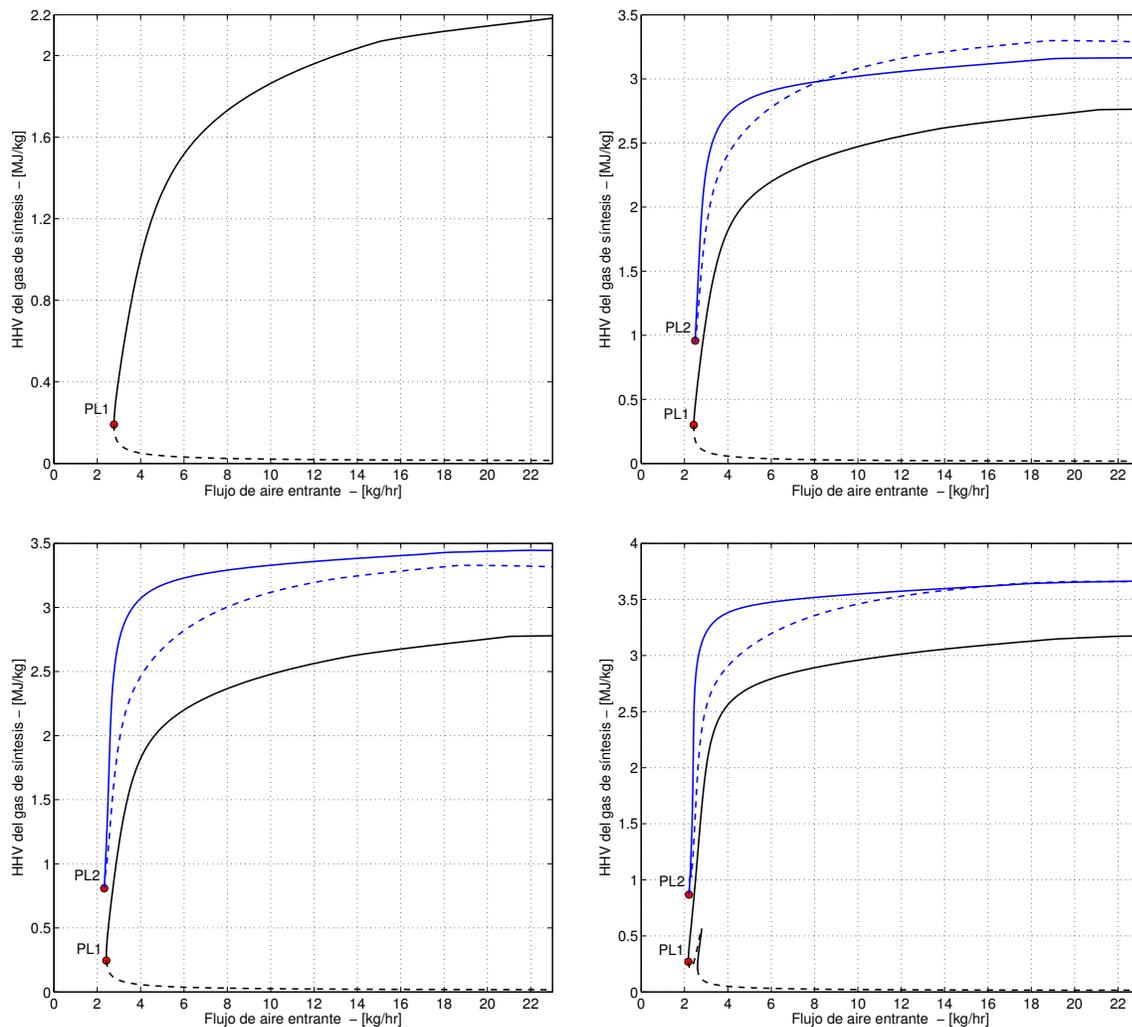


Figura 7.6: Diagramas de bifurcación del poder calórico HHV del gas de síntesis con respecto al flujo de aire entrante de los modelos de 1, 2, 3, 5-RCTAs de diferente volumen y dispersión de calor de $\mathcal{D}_H = 0.227\text{cm}^2/\text{s}$ y $Pe_H = 1.72$.

En cuanto al comportamiento dinámico no local, el diagrama de bifurcación magnificado de la figura 7.8 muestra que es posible la transición entre los EEs estables en ambas direcciones, es decir, que el movimiento del frente de reacción bidireccional del gasificador es factible al aumentar o disminuir el flujo de aire entrante, lo cual es corroborado con simulaciones transitorias.

El análisis de bifurcaciones presentado en las figuras 7.5-7.6 se repitió para varios valores del factor de corrección a la conductividad efectiva y por lo tanto del número de Peclet de calor del reactor, encontrando que: (i) la estructura del diagrama de bifurcación con respecto al flujo de aire de los modelos de N -RCTAs del gasificador de biomasa se consolida

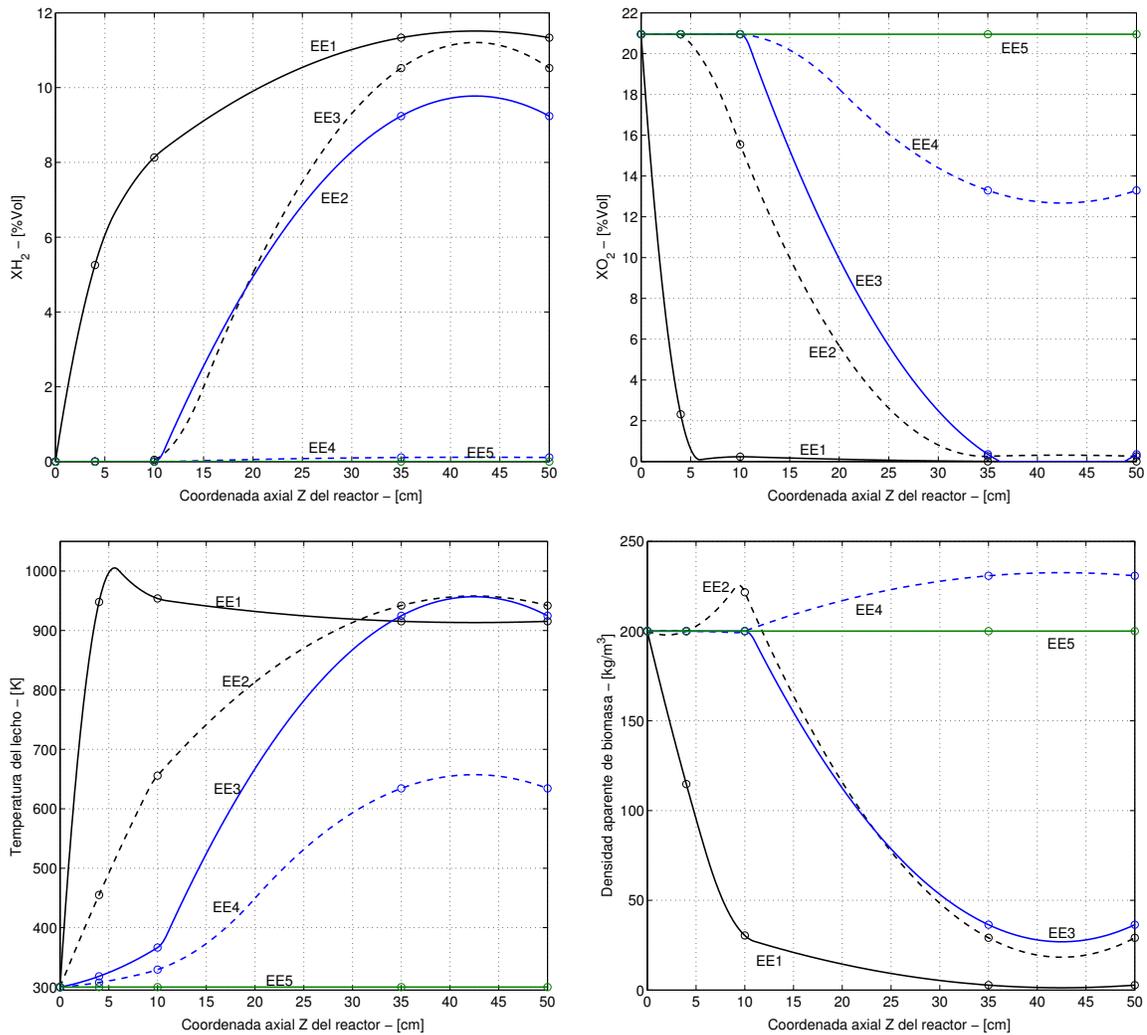


Figura 7.7: Los 5 perfiles de EE de algunas concentraciones del gas (H_2 y O_2), temperatura y densidad aparente de biomasa para el modelo de 3-RCTAs de diferente volumen con flujo de aire entrante de 13.5kg/hr y dispersión de calor de $\mathcal{D}_H = 0.227\text{cm}^2/\text{s}$ y $Pe_H = 1.72$.

para valores de $Pe_H < 2.5$, y (ii) cuando se varía el número Peclet de calor en el intervalo $2.5 < Pe_H < 86.5$ se observa que $N - 2$ islas se acercan progresivamente hasta fusionarse a una de las 2 islas que prevalecen en el diagrama de bifurcación del tren de N -RCTAs para $Pe_H < 2.5$.

Adicionalmente, se realizan simulaciones transitorias (las cuales no se incluyen por economía de espacio y para evitar redundancia en este trabajo) con un modelo de $N = 12$ -RCTAs de idéntico volumen para el gasificador de biomasa, corroborando que la estructura de 5 EEs del modelo de N -RCTAs se preserva al incrementar el número de RCTAs N con un nivel de dispersión correspondiente a un $Pe_H = 1.72$.

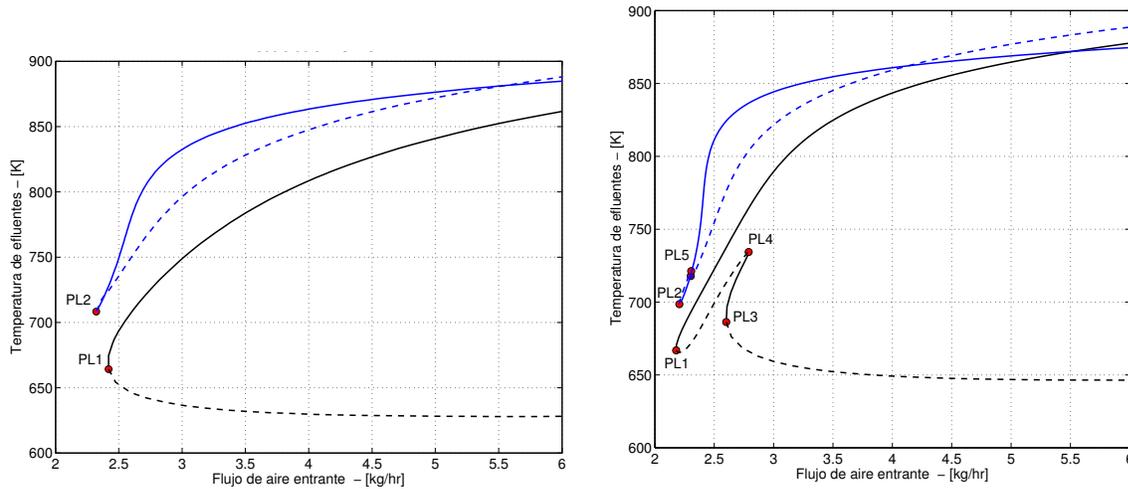


Figura 7.8: Diagramas de bifurcación magnificados de la temperatura del gas de síntesis efluente en la región de bajo flujo de aire entrante de los modelos de 3, 5-RCTAs de diferente volumen y dispersión de calor de $\mathcal{D}_H = 0.227\text{cm}^2/\text{s}$ y $Pe_H = 1.72$.

En relación al conjunto de valores ($Pe_H < 2.5$) que debe tomar el número de Peclet térmico (o el nivel de retro-mezclado con respecto al flujo hacia adelante de calor entre los tanques en el modelo de parámetros concentrados) para reproducir un comportamiento estático y dinámico no lineal factible es congruente con el valor típico del número de Peclet de calor caracterizado para el reactor de biomasa con teoría de reactores químicos de lecho empacado (García Anaya, 2014).

7.4. Análisis de resultados.

El efecto de del flujo de aire alimentado en el comportamiento no lineal global del reactor de biomasa del caso de estudio fue analizado usando distintos modelos en parámetros concentrados de N -RCTAs a la luz de la incertidumbre en el parámetro de dispersión de calor del modelo distribuido asociado. En particular, el estudio de caracterización racional de la conductividad térmica efectiva de García Anaya (2014) guió el análisis no lineal con respecto al retro-mezclado de calor del modelo de N -RCTAs (o equivalentemente con respecto a la dispersión térmica del modelo distribuido). El análisis de bifurcaciones y estabilidad desarrollado en varios modelos de N -RCTAs con $N = 1, 2, 3, 5, 12$ ha mostrado que:

- La multiplicidad de EEs del comportamiento estático del tren de N -RCTAs se manifiesta como un diagrama de bifurcación de tipo isola al variar el flujo de alimentación de aire y sólido.
- El número de estados estacionarios y su región de existencia (conjunto de valores de

flujo de aire) del tren de N -RCTAs con retro-mezclado depende del número de RCTAs N si la dispersión de calor es muy baja ($\mathcal{D}_H = 0.454\text{mm}^2/\text{s}$ y $Pe_H = 86.5$).

- El tren de N -RCTAs con retro-mezclado de calor correspondiente a una dispersión de $\mathcal{D}_H = 0.227\text{cm}^2/\text{s}$ (o número de Peclet $Pe_H = 1.72$) exhibe una multiplicidad máxima de 5 estados estacionarios (de los cuales 3 son estables y 2 inestables) con independencia de N para $N > 2$ y con retro-mezclado equivalente a un $Pe_H < 2.5$, es decir, si se emplean mallas espaciales de más de 1 nodo interno (3 nodos en total) en la discretización. Los perfiles estacionarios correspondientes son cualitativamente similares a los encontrados en el gasificador de carbón de flujos en contracorriente por Amundson y Arri (1978) y Caram y Fuentes (1982).
- Sólo el estado estacionario de reacción estabilizada en la cima y el estado de extinción son estructuralmente estables ante decrementos subsecuentes del $Pe_H < 1$ o incrementos significativos de la dispersión y retro-mezclado de calor.
- Seleccionando un nivel adecuado de retro-mezclado de calor es posible reproducir un diagrama de bifurcación del reactor de flujos concurrentes de biomasa con las mismas características cualitativas del diagrama de bifurcación del reactor de flujos en contracorriente de carbón obtenido por (Caram y Fuentes, 1982) y (Amundson y Arri, 1978). Por lo tanto, aspectos clave del comportamiento dinámico del gasificador observados experimentalmente como el frente de reacción viajera bidireccional al aumentar o disminuir el flujo de aire o sólido alimentados. Esto último se puede explicar como una consecuencia de la histéresis local dentro de la isola del diagrama de bifurcación que da lugar a la reversibilidad de la transición entre el EE con frente de reacción estabilizado en la cima al EE con frente de reacción estabilizado en el fondo del reactor.

De acuerdo a estas consideraciones es posible analizar, capturar y completar la descripción de características esenciales del comportamiento estático y dinámico complejo no lineal exhibido por el reactor de gasificación de biomasa del caso de estudio mediante un modelo de un mínimo número de RCTAs (de 3 a 5) con un nivel adecuado de retro-mezclado de calor (correspondiente a un $1 < Pe_H < 2.5$) y una selección apropiada de los N volúmenes: V_1, V_2, \dots, V_N .

Capítulo 8

Conclusiones

En la presente tesis se ha desarrollado un método de diseño de modelo de orden reducido adecuado para diseño de equipo y operación del proceso, estrategias de monitoreo y de control de reactores de gasificación de lecho móvil. El comportamiento dinámico y estático no lineal de un reactor tubular de gasificación puede ser descrita con una precisión prescrita, por medio de un modelo de N -RCTAs con: (i) flujos hacia adelante y de retro-mezclado que representan el transporte convectivo y difusivo en el reactor, (ii) suposición de estado cuasi-estacionario para la fase gas, (iii) selección basada en la estequiometría de las combinaciones de concentraciones correspondientes a las componentes invariantes (o componentes reactivas) con mecanismos de transporte únicamente (o con término de transporte y de reacción) en sus ecuaciones de balance molares. El número N de tanques y sus volúmenes (V_1, V_2, \dots, V_N) son considerados grados de libertad de diseño que son elegidos de acuerdo a un propósito de modelado específico, a la luz de la incertidumbre paramétrica del modelo y experimental.

El punto de partida del método de diseño desarrollado fue un modelo distribuido con dispersión de gasificadores de lecho empacado basado en primeros principios que incorpora los fenómenos físico-químicos principales considerados en estudios de modelado recientes (Di Blasi, 2000, 2004; Shwe, 2004). Tal modelo en EDPs posee múltiples escalas de tiempo/espacio debido a la coexistencia de procesos rápidos como la transferencia de calor, combustión y pirólisis, reacciones de reducción lentas en el término fuente y transporte por dispersión y convección en las ecuaciones de conservación de masa y energía. Por lo tanto, el modelo continuo distribuido exhibe una rigidez de moderada a alta y su solución numérica (o discretización) es un problema mal condicionado y con alta sensibilidad paramétrica.

El presente método de modelado fue aplicado al caso ejemplo del gasificador de biomasa de flujos descendentes paralelos, logrando una simplificación significativa del modelo dinámico: un modelo de 3-tanques con volúmenes diferentes. El modelo resultante de 9 EDOs describe los comportamientos estático y dinámico del reactor con precisión similar a la obtenida con simuladores numéricos del modelo en EDPs, los cuales producen modelos de 1800 a 7000 EDOs.

Las capacidades de descripción del modelo de 3-tanques (9 EDOs) del gasificador de biomasa exceden a las capacidades de los modelos estándar de alto orden utilizados en

simuladores numéricos de EDPs, en el sentido de que es posible determinar características del comportamiento no lineal global del reactor de gasificación de flujos concurrentes como la multiplicidad de EEs y su estabilidad mediante un análisis de bifurcaciones del tren de $N = 3$ -RCTAs. Esto se debe a que dicho análisis global no ha sido realizado para el reactor de biomasa en la literatura dada la alta complejidad y rigidez de los modelos estándar de alto orden empleados en la simulaciones numéricas de EDPs.

De acuerdo al análisis de bifurcaciones llevado a cabo en este estudio es posible reproducir y completar la descripción de características esenciales del comportamiento dinámico y estático no lineales del reactor de gasificación de biomasa de flujos concurrentes mediante un modelo de un número reducido ($3 < N < 5$) de RCTAs y con estabilidad estructural respecto a N para $N > 2$ al diseñar de forma conjunta el número de tanques N , sus volúmenes y parámetros de transporte del modelo como el retro-mezclado \mathbf{q}^b o equivalentemente, la dispersión D_H en el modelo distribuido.

Se estableció la factibilidad de capturar mediante un modelo dinámico de orden bajo, aspectos fundamentales como la multiplicidad y estabilidad del comportamiento no lineal de la clase de reactores de gasificación de lecho empacado en su operación a contracorriente y concurrente, así como de lecho móvil y fijo. Dicho modelo de dimensión finita reducida tiene una estructura ajustable y simple, y a su vez, provee un significado físico intuitivo ya que puede ser interpretado como una interconexión en cascada con retro-mezclado de un número reducido de RCTAs multicomponentes, no isotérmicos y de diferente volumen, o de forma más general, como un proceso de N etapas de volumen variable. Las ventajas que ofrece dicho sentido físico del modelo en parámetros concentrados de orden reducido sobre el modelo distribuido se enumeran a continuación:

- Posibilita la adaptación o aplicación directa a reactores de gasificación de las estrategias de diseño de equipo, control y estimación extensamente estudiadas y propuestas para sistemas de procesos por etapas como columnas de destilación o trenes de N -RCTAs.
- Es compatible con la idea básica de dividir el reactor para análisis y diseño de equipo en 4 zonas o estratos en cada una de las cuales domina un proceso físico-químico: secado, pirólisis, combustión y reducción.

El método de diseño de modelo propuesto permite determinar el menor número N de RCTAs necesarios para reproducir el comportamiento de un gasificador de lecho móvil con una precisión adecuada en términos del objetivo de modelado en particular y de la incertidumbre del modelo y experimental del reactor específico bajo estudio.

El diseño de modelo desarrollado en esta tesis es equivalente al diseño de un observador de lazo abierto (sin innovación de sensores) dado un objetivo de estimación de variables de concentración, temperatura y flujo derivado del propósito de modelado y con las limitaciones impuestas por la incertidumbre experimental y del modelo.

El método de diseño de modelo propuesto permite la realización de estudios para:

- Análisis de estabilidad estructural y multiplicidad de estados estacionarios con el objetivo de garantizar un diseño de operación y equipo con un desempeño seguro y eficiente.
- Síntesis de estrategias de control convencionales o avanzadas de reactores de gasificación.
- Diseño y validación de observadores de las variables de concentración basados en mediciones de temperatura para propósitos de control y/o de monitoreo de gasificadores de lecho empacado.

Un diseño racional de los parámetros del modelo de N -RCTAs (es decir, $N, V_1, V_2, \dots, V_N, \mathbf{q}_0^b, \mathbf{q}_1^b, \dots, \mathbf{q}_N^b$) acompañado de un estudio no lineal global basado en bifurcaciones debe ser realizado en vista de los mecanismos de transporte más importantes que intervienen en el proceso de gasificación (provistos por experimentos) con el objetivo de evitar respuestas irreales y sin relevancia física (espurias) relacionadas con la operación en estado estacionario y transitoria de reactores en gasificación de lecho empacado, incluso utilizando simulaciones del modelo en EDPs con discretizaciones espaciales de alto orden cuando las reacciones involucradas tienen números de Damkhöler altos.

El estudio no lineal basado en bifurcaciones del modelo de N -RCTAs para un reactor de gasificación llevado a cabo en esta tesis establece que la simulación numérica de los modelos basados en primeros principios (tanto de parámetros distribuidos como concentrados) es susceptible de los distintos problemas de convergencia que se presentan en el Apéndice D derivados del comportamiento espurio o sin relevancia física inducido por el método de discretización y un conjunto de valores de sus parámetros asociados. Dichas implicaciones se extienden al campo de la DFC donde se emplean modelos discretizados mediante diversos métodos numéricos proveyendo una nueva perspectiva de análisis formal y sistemático para la elección de mallas de discretización y estudios de independencia de soluciones numéricas de la malla de discretización para validación de modelos para sistemas de procesos reactivos en los que intervienen mecanismos de transporte advectivos, difusivos o dispersivos.

8.1. Trabajo futuro.

El esquema de diseño desarrollado en esta tesis es capaz de obtener un modelo con un buen compromiso entre su complejidad y su grado de precisión en las variables de concentración y temperatura del reactor de gasificación dado un objetivo de modelado. Sin embargo, dicho esquema constituye una primera aproximación para el desarrollo de un marco de modelado generalizado de sistemas de procesos termo-químicos para diseño de reactores y estrategias de control y monitoreo. En este sentido, se sugieren a continuación un conjunto de acciones que se deben explorar en el futuro que complementan los diferentes aspectos del diseño de modelo abordados en el presente estudio:

1. De acuerdo al estudio de modelado desarrollado en esta tesis, el papel de la dispersión (o equivalentemente el retro-mezclado) de calor y masa en los modelos distribuidos y de parámetros concentrados de los reactores de gasificación de lecho empacado de flujos concurrentes es fundamental, por lo que debe realizarse en el futuro un estudio experimental con respuestas al impulso y escalón de trazadores con el objetivo de identificar coeficientes de dispersión (o retro-mezclado) de masa y calor del sistema distribuido de procesos. De esta manera, se garantiza que parámetros de operación como la temperatura y los flujos de alimentación que producen un desempeño óptimo en estado estacionario y en el mecanismo de ignición del reactor sean determinados mediante un modelo de baja dimensión con una precisión prescrita por el propósito de modelado.
2. Reducir la rigidez y la sensibilidad del modelo distribuido de dispersión causado por la intensidad de los términos fuente de reacción e intercambio de calor (altos números de Damköhler y de Stanton) mediante un esquema de perturbaciones singulares análogo al propuesto por Countou-Carrere y Daoutidis (2008) para un reactor tubular multicomponente con transporte por convección únicamente.
3. Resulta necesario explorar en un estudio subsecuente un cambio de coordenadas de las componentes reactivas con sentido físico para redes de reacción de gasificación de biomasa análogo al desarrollado por García Anaya (2014), ya que el método basado en la descomposición de valores singulares propuesto en este estudio produce una transformación de coordenadas que es robusta a errores o desviaciones de los coeficientes estequiométricos pero carece de un sentido químico evidente.
4. Desarrollar un método sistemático para determinar el número de tanques N y sus volúmenes V_1, V_2, \dots, V_N del modelo de N -RCTAs dada una incertidumbre y un error de estimación de un conjunto de variables de estado requerido por el objetivo de modelado. Con el objetivo de evaluar las limitaciones de los modelos diseñados, se plantea el problema inverso: dado un tren de N -tanques con volúmenes V_1, V_2, \dots, V_N , cuál es el error de estimación de un grupo de variables de estado. El estudio de Canales~Meza (2013) constituye una primera aproximación para sistematizar la selección de N y V_1, V_2, \dots, V_N .
5. Validación del modelo de bajo orden deducido en planta piloto de gasificación de biomasa de pequeña escala adquirida por el Instituto de Ingeniería mediante pruebas experimentales que permitan:
 - Obtener tiempos de respuesta entre modos de operación: encendido, cambios de demanda de gas de síntesis y apagado.
 - Medir los flujos de salida del gas de síntesis y/o fracción de carbonizado convertido en gas (eficiencia del proceso) bajo diferentes condiciones de operación (variando el flujo de aire y biomasa entrantes).

6. Investigar el mecanismo de ignición o encendido del reactor de gasificación de biomasa mediante un análisis del diagrama de bifurcación generado al variar la temperatura entrante de los flujos reactantes, utilizando el esquema de modelado de N -RCTAs propuesto.
7. Desarrollar de un criterio de colocación de sensores de temperatura para monitoreo y/o control de gasificadores de lecho empacado basado en el modelo de dimensión finita de N -RCTAs diseñado mediante el método propuesto.
8. Diseñar un observador basado en el modelo de dimensión finita de N -RCTAs en cascada con retro-mezclado. La síntesis de un estimador para un gasificador está relacionada con las siguientes acciones:
 - Diseñar una o más estructuras de estimación detectables para un gasificador de lecho empacado y evaluar su funcionamiento.
 - Determinar la estructura más simple que cumpla con los objetivos de estimación.
9. Extender la aplicación del modelo de N -RCTAs a reactores con geometrías mas complejas como el gasificador Imbert. Esto posibilitará la caracterización de la estabilidad estructural de sus EEs mediante el análisis de diagramas de bifurcación generados al variar los flujos entrantes de aire y de sólido.
10. Aplicar el método de diseño de modelo desarrollado aquí en gasificadores de lecho móvil de flujos en contracorriente como el reactor tipo Lurgi de carbón analizado en Caram y Fuentes (1982), (Amundson y Arri, 1978). Así mismo, determinar las diferencias entre las operaciones de flujos concurrentes y en contracorriente en términos de la complejidad del comportamiento no lineal (tipos de bifurcaciones y estabilidad) exhibido.
11. Explorar la factibilidad de plantear el modelo distribuido con dispersión de gasificadores de lecho móvil como un modelo de frontera móvil aplicando la Regla de Leibnitz a fin de reproducir el comportamiento de frente de reacción viajero con mayor precisión utilizando un modelo de N -RCTAs de dimensión baja.

Apéndice A

Métodos de reducción y simplificación de modelo.

Los reactores químicos son sistemas dinámicos complejos cuyo desempeño está determinado por las interacciones de una variedad de procesos físico-químicos. En consecuencia, los modelos basados en primeros principios que describen su comportamiento son sistemas de ecuaciones diferenciales no lineales cuyas variables de estado exhiben una estructura de múltiples escalas.

El análisis exacto de dichos modelos es complicado y en ocasiones, resulta intratable. Por lo tanto, el estudio del comportamiento de los sistemas reactivos mediante modelos matemáticos fenomenológicos implica deducir a partir del modelo original un modelo aproximado simplificado cuyo análisis es tratable. La amplia diversidad de métodos matemáticos utilizados para este fin son clasificados en dos categorías: (i) métodos numéricos, los cuales implican la discretización del modelo, y (ii) métodos asintóticos, cuyo análisis está basado en la teoría de perturbaciones que estudia la dependencia del comportamiento dinámico en uno o varios parámetros de perturbación del modelo sin afectar la naturaleza continua de las variables.

El método de diseño de modelo propuesto combina la aplicación de esquemas de modelado simplificado pertenecientes a ambas categorías: perturbaciones singulares y métodos de discretización del dominio espacial del reactor: diferencias finitas y volumen finito.

El presente apéndice muestra un panorama general de los fundamentos teóricos que legitiman las estrategias de simplificación y reducción de modelo aplicadas en el campo de la ingeniería de procesos y reactores con el objetivo de enfatizar los alcances y limitaciones de dichos métodos, así como, situarlos en un marco general de análisis y síntesis de modelos.

La primera parte se dedica a la descripción general de los métodos de perturbaciones singulares en el contexto de sistemas dinámicos de parámetros concentrados. Posteriormente, se da una revisión del estado del arte de los métodos de reducción de orden aplicados a sistemas dinámicos de parámetros distribuidos reactivos.

A.1. Métodos de perturbaciones singulares.

El objetivo de esta sección consiste en presentar un marco de modelado simplificado constituido por esquemas de reducción de orden basados en los métodos estándar de perturbaciones singulares, los cuales son capaces de revelar dos aspectos esenciales del sistema dinámico analizado: (i) propiedades estructurales que no son evidentes en el modelo original como el grado de interacción entre los componentes del sistema y la intensidad de los efectos no lineales, y (ii) el comportamiento de múltiples escalas de tiempo y espacio inherente a los reactores de lecho empacado de gasificación.

Una revisión general de los conceptos y fundamentos básicos de las series asintóticas y la teoría de perturbaciones singulares estándar para sistemas dinámicos de dimensión finita se presenta en el apéndice B. En esta sección se ilustran las ideas básicas de los métodos de perturbaciones singulares con énfasis en su aplicación a sistemas dinámicos con parámetros concentrados de la forma (A.1), las cuales son invariantes en esencia para sistemas dinámicos de dimensión infinita. El método de reducción de modelo que se presenta en esta sección se basa en la teoría de perturbaciones singulares orientada al análisis de estabilidad y control de sistemas dinámicos con parámetros concentrados de (Kokotovic *et al.*, 1999; Khalil, 2002).

$$\dot{y} = f(t, y, \varepsilon), \quad y \in \mathbb{R}^r \quad (\text{A.1})$$

Los métodos de perturbaciones singulares están constituidos por una familia muy amplia de herramientas sistemáticas que permiten obtener modelos reducidos explotando la pequeñez de un parámetro del sistema denotado por ε mediante expansiones asintóticas de las variables de estado del modelo completo original (A.1). La solución $\tilde{y}(t, \varepsilon)$ del sistema dinámico que conforma al modelo simplificado es por lo tanto una aproximación de la solución $y(t, \varepsilon)$ del sistema o modelo completo. El error de la aproximación para una serie asintótica (A.2) de N términos es del orden del parámetro pequeño ε elevado a la N -ésima potencia, denotado como $O(\varepsilon^N)$. Dado que ε es muy pequeño, es posible lograr un error de aproximación bajo empleando expansiones asintóticas con un número reducido N de términos (Khalil, 2002).

$$\tilde{y}(t, \varepsilon) = \sum_{i=0}^{N-1} y_i(t) \varepsilon^i \quad (\text{A.2})$$

Una manifestación fundamental de la pequeñez del parámetro de perturbación singular ε es el comportamiento de múltiples escalas de variación que exhiben algunas variables del modelo.

La teoría de perturbaciones singulares estándar estudia una clase de modelos dinámicos que exhibe una estructura de dos escalas de tiempo determinada por un parámetro pequeño ε . De acuerdo a ésta teoría es posible clasificar las variables de estado del modelo en dos tipos: estados con variación lenta, y variables caracterizadas por la presencia de una variación

rápida en un intervalo de tiempo inicial pequeño $[t_0, t_\varepsilon]$ conocida como capa límite inicial, seguida de una evolución lenta guiada por las variables del primer tipo para $t > t_\varepsilon$. Debido a este papel determinante de las variables lentas se dice que ellas aportan la dinámica dominante o esencial del sistema.

A continuación se describe el método de reducción de modelo basado en perturbaciones singulares estándar para sistemas dinámicos de dimensión finita modelados mediante EDOs con condiciones iniciales:

1. Transformar el modelo a la forma estándar de perturbaciones singulares:

$$\dot{x} = f(t, x, z, \varepsilon), \quad x(t_0) = \xi(\varepsilon), \quad x \in \mathbb{R}^n \quad (\text{A.3})$$

$$\varepsilon \dot{z} = g(t, x, z, \varepsilon), \quad z(t_0) = \eta(\varepsilon), \quad z \in \mathbb{R}^m \quad (\text{A.4})$$

La forma estándar (A.3)-(A.4) es una representación del modelo que permite separar el espacio de estados del sistema de dimensión $r = n + m$ en dos subconjuntos: el subespacio de dimensión m de las variables rápidas z y el subespacio con dimensión n de variables lentas x . Encontrar una transformación de coordenadas que lleve al modelo a la forma estándar es un problema no trivial y en el que la intuición física del problema juega un papel determinante. El conocimiento de los componentes y los procesos físicos que componen el sistema, así como, su importancia relativa en su respuesta a estímulos externos facilita la identificación de las diferentes escalas de tiempo del modelo mediante el análisis de perturbaciones singulares de uno o varios parámetros de perturbación. El tipo de transformación más sencillo y más ampliamente utilizado es el escalamiento o normalización de variables que representa el modelo en términos de variables y parámetros adimensionales.

2. Obtener el modelo reducido nominal. El modelo aproximado más simple se obtiene al anular el efecto del parámetro pequeño de perturbación ó $\varepsilon = 0$:

$$\dot{\bar{x}} = f(t, \bar{x}, \bar{z}, 0), \quad \bar{x}(t_0) = \xi(0) = \xi_0 \quad (\text{A.5})$$

$$0 = g(t, \bar{x}, \bar{z}, 0) \quad (\text{A.6})$$

El sistema dinámico resultante está compuesto de n ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento de los estados del vector \bar{x} y m restricciones algebraicas (A.6) que determinan el valor de las variables del vector \bar{z} en la escala de tiempo lenta del sistema t . Por lo tanto, la dimensión del sistema se reduce de $n + m$ estados (número de ODEs) en el modelo original (A.3)-(A.4) a n estados en el modelo reducido (A.5)-(A.6) debido a que el sistema de m ecuaciones diferenciales (A.4) degeneran en un sistema de m ecuaciones algebraicas (A.6), cuya solución $\bar{z} = h(t, \bar{x})$ es el estado estacionario del subsistema dinámico de las variables rápidas. De esta manera, las m condiciones iniciales de z se pierden en la escala lenta debido a que con $\varepsilon = 0$ las variables rápidas z convergen a su estado de equilibrio \bar{z} instantáneamente (con velocidad infinita) si éste es único y estable. Sin embargo, en general el sistema algebraico (A.6)

es no lineal y puede tener $k \geq 1$ soluciones reales aisladas \bar{z}_k , originando una multiplicidad de modelos reducidos, al sustituir cada solución \bar{z}_k en el sistema de ecuaciones diferenciales (A.5):

$$\dot{\bar{x}} = f(t, \bar{x}, h(t, \bar{x}), 0), \quad (\text{A.7})$$

$$\bar{z} = h(t, \bar{x}) \quad (\text{A.8})$$

Estos sistemas son conocidos como modelos de estado cuasiestacionario o modelos lentos porque capturan la componente lenta dominante del modelo completo denotada como (\bar{x}, \bar{z}) . Las variables \bar{z} están en estado cuasiestacionario debido a que su estado de equilibrio (A.8) depende de las variables de estado lentas \bar{x} . Por lo tanto, la evolución aparente (dada por el cambio del punto de equilibrio parametrizado por \bar{x}) de las variables de estado \bar{z} está dominada por la evolución de las variables lentas \bar{x} . Resulta esencial resaltar el posible carácter local del modelo reducido (A.7)-(A.8), dada la multiplicidad de z_k soluciones que representan los k estados estacionarios de \bar{z} parametrizados por \bar{x} (Kokotovic *et al.*, 1999). Es por ello que para determinar la región de validez del modelo en el espacio de estados es necesario conocer la historia inicial en la capa límite de los estados rápidos z mediante un modelo apropiado obtenido en el siguiente paso.

3. Obtener el modelo de capa límite del sistema. Con el propósito de tener una visión completa de la evolución de los estados del sistema se obtiene un modelo que proporciona el comportamiento de las variables rápidas z en el intervalo de tiempo inicial desde que $z = z(t_0)$ hasta que llega a su estado cuasiestacionario $\bar{z} = h(t, \bar{x})$. Dicho periodo de tiempo de variación rápida de z es la capa límite inicial del sistema.

$$\frac{d\hat{z}}{d\tau} = g(t, \xi_0, \hat{z} + h(t, \xi_0), 0), \quad \hat{z}(0) = \eta(0) - h(t_0, \xi_0) \quad (\text{A.9})$$

donde $\hat{z}(t) = z(t) - h(t, \bar{x})$. El subsistema (A.9) describe la evolución de la componente rápida de z denotada por \hat{z} en la escala de tiempo rápida del sistema $\tau = t/\varepsilon$. Cabe señalar que el modelo de la dinámica rápida del sistema está desacoplado de las variables de estado x debido a que éstas se encuentran congeladas en su valor inicial en la escala de tiempo rápida. De acuerdo a este argumento, la componente rápida de z no tiene efecto en el comportamiento dinámico a largo plazo del sistema, al fijar las condiciones iniciales. Sin embargo, el modelo de capa límite puede jugar un papel esencial en la comprensión del comportamiento dinámico no local del modelo completo al describir la dinámica de transición entre modelos reducidos diferentes correspondientes a regiones de atracción y repulsión de estados estacionarios múltiples, así como, caracterizar las bifurcaciones asociadas.

4. Validar el conjunto de modelos reducidos. Dada la posibilidad de multiplicidad de modelos reducidos locales es necesario evaluar su región de validez. Según la teoría de perturbaciones singulares estándar (Tikhonov, 1952; Vasil'eva, 1963) una condición

suficiente para que la solución del modelo reducido sea una aproximación uniforme de primer orden (A.10)-(A.11) de la solución del modelo completo es la estabilidad exponencial del origen $\hat{z}(t) = 0$ (estado cuasiestacionario $z(t) = h(t, \bar{x})$) del modelo de capa límite uniforme en los parámetros (t, \bar{x}) .

$$x(t, \varepsilon) = \bar{x}(t) + O(\varepsilon) \quad \forall t \in [t_0, t_1] \quad (\text{A.10})$$

$$z(t, \varepsilon) = \bar{z}(t) + O(\varepsilon) \quad \forall t \in [t_b, t_1], \quad t_b > t_0 \quad (\text{A.11})$$

Para obtener una aproximación uniforme de las variables rápidas en todo un intervalo de tiempo es necesario agregar la solución del modelo de capa límite:

$$z(t, \varepsilon) = \bar{z}(t) + \hat{z}(t) + O(\varepsilon) \quad \forall t \in [t_0, t_1] \quad (\text{A.12})$$

El hecho de que la validez se garantice para un intervalo de tiempo finito $[t_0, t_1]$ se debe a que para $t > t_1$ los estados del sistema pueden moverse hacia la región de atracción de un estado estacionario o ciclo límite descrito por otro modelo reducido. Para que un modelo reducido sea válido en el intervalo de tiempo infinito una condición suficiente es la estabilidad exponencial de algún equilibrio del modelo reducido (A.7) de acuerdo al teorema de (Hoppensteadt, 1966).

Una interpretación geométrica en términos de conjuntos o variedades invariantes lentos y rápidos del espacio de estados del modelo completo en su forma estándar de perturbaciones singulares puede proporcionar una mejor comprensión de éste comportamiento típico para esta clase de sistemas.

Las ideas fundamentales del método de perturbaciones singulares para sistemas dinámicos de dimensión finita modelados mediante ecuaciones diferenciales ordinarias con condiciones iniciales se extienden de forma natural a ecuaciones diferenciales parciales y ordinarias con condiciones de frontera. Naidu (1988) da un panorama general del método de perturbaciones singulares aplicado a sistemas de EDOs con condiciones de frontera y sistemas discretos representados por ecuaciones en diferencias. En consecuencia, dado un modelo, sea éste estático o dinámico, y de naturaleza distribuida o en parámetros concentrados, la influencia del pequeño parámetro ε en sus variables se presentará como transiciones rápidas en regiones pequeñas del dominio llamadas capas límites acompañadas de variaciones suaves en el resto del dominio. La ubicación de las capas límite en el dominio espacial o temporal da lugar a diferentes tipos de perturbaciones singulares:

1. Capa límite inicial. El sistema dinámico en parámetros concentrados exhibe una estructura definida de dos o más escalas de tiempo, en la que algunas variables tienen transiciones rápidas en una vecindad del tiempo inicial acompañadas de variaciones lentas en un tiempo posterior, mientras que otras sólo presentan un comportamiento lento.

2. Capa límite de frontera. Se suscitan en ecuaciones diferenciales con valor a la frontera, los cuales son modelos de estado estacionario para sistemas de parámetros distribuidos. Las transiciones rápidas de las variables del sistema pueden presentarse en vecindades de cualquiera de las fronteras del dominio espacial, de forma análoga a la capa límite inicial.
3. Capa límite inicial y de frontera. Es la combinación de las dos anteriores en sistemas dinámicos con parámetros distribuidos modelados con EDPs.
4. Capa límite interna. A diferencia de la estructura por capas del primer tipo, el efecto de la pequeña perturbación singular se manifiesta en un intervalo de tiempo posterior al inicial en sistemas dinámicos de parámetros concentrados. Se suscita también en sistemas dinámicos distribuidos con una estructura no bien definida de múltiples escalas en la que los efectos de una escala están fuertemente acoplados con las variables de otra escala, es decir, las escalas tienen un efecto acumulativo. Esta clase de problemas es el más complejo y se manifiesta como un frente de onda propagado con una capa límite libre o móvil en los perfiles de las variables del sistema.

En conclusión, los métodos de perturbaciones descomponen en dos escalas de variación el comportamiento de las variables del modelo completo (A.3)-(A.4) y obtienen dos submodelos reducidos: (i) el modelo lento de orden reducido (A.5)-(A.6), y (ii) el modelo rápido de la capa límite (A.9). Dichos submodelos aproximan el comportamiento del modelo completo con un error del orden de ε . Además, estos submodelos son más simples y robustos, en el sentido de que exhiben una menor sensibilidad a errores de modelado (incertidumbre en parámetros, relaciones constitutivas, etc.) que el modelo completo (A.3)-(A.4), el cual es intrínsecamente mal condicionado. Por lo tanto, la resolución numérica de los submodelos simplificados mostrará un desempeño mucho más eficiente que aquel exhibido por el modelo completo, debido a una alta rigidez numérica asociada del sistema de ecuaciones diferenciales (A.3)-(A.4).

El método de perturbaciones singulares estándar realiza una separación del modelo completo en dos escalas de variación aprovechando la pequeñez de un parámetro singular ε . Sin embargo, los sistemas reactivos en general exhiben una estructura de múltiples escalas de variación debida a múltiples parámetros singulares, por lo que una extensión natural del método de dos escalas consiste en considerar a los sistemas multiescala como varios problemas de perturbaciones singulares de un sólo parámetro anidados de forma sistemática (Kokotovic *et al.*, 1999).

Las generalidades de la teoría de perturbaciones singulares presentada en esta sección permean en la mayoría de los métodos de reducción de modelo aplicados a sistemas dinámicos reactivos. De esta manera, las ideas fundamentales tratadas en esta sección constituyen un marco general teórico para la revisión de los métodos de reducción para reactores distribuidos dada en la próxima sección.

A.2. Métodos de reducción de orden de sistemas distribuidos reactivos.

En general, los modelos dinámicos distribuidos involucran procesos físicos y químicos de múltiples escalas que se manifiesta en rigidez (stiffness) y el alto costo computacional en la simulación numérica de las ecuaciones diferenciales y en la sensibilidad ante incertidumbres de modelado o medición, de los controladores u observadores sintetizados a partir de estos modelos. De esta manera surge la necesidad de emplear diversas técnicas de reducción sistemática para deducir modelos dinámicos de parámetros concentrados y de bajo orden que le confieran robustez a los controladores diseñados a partir de ellos mismos (Christofides, 2001).

A.2.1. Clasificación de los sistemas en parámetros distribuidos reactivos.

En la literatura una gran cantidad de sistemas dinámicos distribuidos son modelados empleando dos estructuras generales unidimensionales (una variable independiente espacial z):

1. Sistema en la forma de Divergencia:

$$\frac{\partial \mathbf{E}(u)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{M}(u, \frac{\partial u}{\partial z})}{\partial z} = \mathbf{K}(u, z, t), \quad u, \mathbf{E}, \mathbf{M}, \mathbf{K} \in \mathbb{R}^n \quad (\text{A.13})$$

2. Ley de conservación:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{B}(u, \frac{\partial u}{\partial z})}{\partial z} = \mathbf{S}(u, z, t), \quad u, \mathbf{B}, \mathbf{S} \in \mathbb{R}^n \quad (\text{A.14})$$

donde u es un vector que contiene las variables dependientes fundamentales como concentraciones, temperaturas o velocidades de flujo, \mathbf{M} , \mathbf{B} tienen como elementos los fluxes por transporte convectivo y/o dispersivo/difusivo de masa, energía o momento y los vectores \mathbf{K} , \mathbf{S} agrupan los términos fuente de las ecuaciones de balance.

Partiendo de estas estructuras es posible distinguir dos clases de sistemas distribuidos de acuerdo al tipo de transporte que domina:

1. *Sistemas de transporte convectivo-difusivo-reativos.* Son sistemas en donde el transporte por advección y el transporte por difusión o dispersión coexisten con procesos reactivos.

- a) **Forma de Divergencia.** Esta estructura es un caso de la ecuación A.13 cuando $\mathbf{M}(u) = \mathbf{F}(u) + \mathbf{D}(u) \frac{\partial u}{\partial z}$.

$$\frac{\partial \mathbf{E}(u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mathbf{F}(u) + \mathbf{D}(u) \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \mathbf{K}(u, z, t), \quad u, \mathbf{E}, \mathbf{F}, \mathbf{K} \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{D}(u) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$$

(A.15)

b) **Ley de conservación.** Cuando $\mathbf{B}(u) = \mathbf{Q}(u) + \mathbf{W}(u)\frac{\partial u}{\partial z}$ la ecuación A.14 produce esta ecuación en la forma de ley de conservación.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mathbf{Q}(u) + \mathbf{W}(u) \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \mathbf{S}(u, z, t), \quad u, \mathbf{Q}, \mathbf{S} \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{W}(u) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \quad (\text{A.16})$$

donde los fluxes de transporte advectivo están contenidos en \mathbf{F} y \mathbf{Q} , mientras que los coeficientes de transporte difusivo/dispersivo son elementos de \mathbf{D} y \mathbf{W} .

Los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales (ecuación A.15 y ecuación A.16) son cuasilineales y de segundo grado. Es posible llevar la forma de Divergencia a la forma general de un sistema de ecuaciones diferenciales parciales de primer grado:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{E}(u)}{\partial u} & \mathbf{0}_{n \times n} \\ \mathbf{0}_{n \times n} & \mathbf{0}_{n \times n} \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} u \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial \mathbf{F}(u)}{\partial u} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial \mathbf{D}_i(u)}{\partial u} \mathbf{v}_i \right) & \mathbf{D}(u) \\ \mathbf{I}_{n \times n} & \mathbf{0}_{n \times n} \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} u \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}(u, z, t) \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} \quad (\text{A.17})$$

2. *Sistemas de transporte advectivos reactivos.* Son sistemas distribuidos donde el transporte por dispersión es muy débil y prevalece el transporte convectivo.

$$\frac{\partial \mathbf{E}(u)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(u)}{\partial z} = \mathbf{K}(u, z, t) \quad (\text{A.18})$$

donde $u, \mathbf{E}, \mathbf{F}, \mathbf{K} \in \mathbb{R}^n$ y esta estructura se conoce como **sistema convectivo-reactivo en la forma de Divergencia**.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{Q}(u)}{\partial z} = \mathbf{S}(u, z, t) \quad (\text{A.19})$$

donde $u, \mathbf{Q}, \mathbf{S} \in \mathbb{R}^n$ y esta estructura se conoce como **ley de conservación de sistema convectivo-reactivo**.

Ambas estructuras (ec. A.18 y ec. A.19) pueden ser llevada a la forma general de ecuaciones diferenciales parciales de primer orden:

$$\mathbf{A}(u, z, t) \frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{C}(u, z, t) \frac{\partial u}{\partial z} = \mathbf{S}(u, z, t) \quad (\text{A.20})$$

donde $\mathbf{A}(u, z, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ es una matriz diagonal y $\mathbf{C}(u, z, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ es la matriz Jacobiana $\left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial u} \right)$ del vector de Flujos $\mathbf{F}(u)$ para el caso de la estructura representada por la ecuación (A.19) y una matriz diagonal con las velocidades de flujo para el caso

del sistema en la forma de Divergencia (ecuación A.18).

El sistema de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) de primer orden de la ec. (A.20) es *cuasilineal* debido a que los coeficientes de las derivadas (\mathbf{C} , \mathbf{A}) dependen de u , sin embargo, si se elimina dicha dependencia el sistema dinámico se vuelve *semilineal* y la no linealidad del sistema se debe exclusivamente al término de no homogéneo $\mathbf{S}(u, z, t)$.

El sistema de EDPs de primer grado cuasilineales de la ecuación A.20 puede ser reformulado como un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) de primer grado empleando el **Método Geométrico de Características**. Con base en este método se realiza la clasificación de los sistemas de EDPs de primer grado de acuerdo al carácter de las raíces del polinomio característico $Y = \det(\mathbf{C} - \mathbf{A}\lambda)$ si la matriz \mathbf{C} es singular ó del polinomio característico $X = \det(\mathbf{A} - \mathbf{C}\omega)$ si la matriz \mathbf{A} es singular (Zauderer, 1989):

- a) **Hiperbólico**. Si las n raíces del polinomio característico Y ó X son reales, distintas y el problema de eigenvalores generalizado asociado: $(\mathbf{C} - \mathbf{A}\lambda)\mathbf{p} = 0$ a Y ó $(\mathbf{A} - \mathbf{C}\omega)\mathbf{q} = 0$ a X tiene n soluciones linealmente independientes.
- b) **Parabólico**. Si las n raíces de Y ó X son reales pero el problema de eigenvalores generalizado asociado tiene $m < n$ soluciones linealmente independientes.
- c) **Elíptico**. Si Y ó X no tienen raíces reales.
- d) **Hiperbólico débil**. Si las n raíces del polinomio característico Y ó X son reales, algunas iguales y el problema de eigenvalores generalizado correspondiente tiene n soluciones linealmente independientes.

Condición suficiente para rango completo del problema de eigenvalor generalizado (Bai *et al.*, 2000). Si las dos matrices asociadas al problema de eigenvalor generalizado \mathbf{C} y \mathbf{A} son hermitianas (ó simétricas reales) y \mathbf{A} ó \mathbf{C} es positiva definida, entonces los eigenvalores son reales y existen n eigenvectores linealmente independientes que forman una base del eigenespacio. Con esta condición se garantiza que la multiplicidad algebraica y la multiplicidad geométrica de los eigenvalores sea igual.

A continuación, se da una revisión de los métodos de reducción principales categorizados de acuerdo al tipo de ecuaciones diferenciales parciales a las que son aplicables.

A.2.2. Métodos de perturbaciones singulares para sistemas hiperbólicos.

Los métodos de reducción de modelo para sistemas distribuidos disipativos, representados por sistemas de EDPs parabólicas, se basan en la idea de que el espectro del operador espacial de transporte se puede descomponer en un espectro lento de dimensión finita y uno

rápido y estable con dimensión infinita (Christofides y Daoutidis, 1997). Dichos métodos no son aplicables a los sistemas hiperbólicos porque todos los eigenvalores del operador espacial diferencial convectivo contienen la misma cantidad de energía (Countou-Carrere y Daoutidis, 2008).

Por lo tanto, una metodología alternativa de reducción de modelo es aplicada a sistemas distribuidos reactivos en los que el transporte convectivo domina sobre el transporte dispersivo y difusivo, representados por sistemas de EDPs hiperbólicas (A.20).

El estudio reciente de (Countou-Carrere y Daoutidis, 2008) desarrolla un método en el que combina la teoría de perturbaciones singulares estándar y el método geométrico de características al modelo de un reactor tubular multicomponente de una sola fase sin dispersión, el cual se presenta a continuación utilizando una notación similar a la del modelo distribuido del gasificador (2.4):

$$\frac{\partial C_i}{\partial t'} = -u \frac{\partial C_i}{\partial Z} + \sum_{j=1}^m s_{i,j} \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, T), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (\text{A.21a})$$

$$\frac{\partial T}{\partial t'} = -u \frac{\partial T}{\partial Z} - \frac{1}{C_T C_p} \sum_{j=1}^m \Delta H_j \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, T) - \frac{h A_v}{C_T C_p} (T - T_w) \quad (\text{A.21b})$$

El comportamiento de múltiples escalas en el reactor de flujo pistón se manifiesta tanto en el tiempo como en el espacio, con una capa límite de frontera e inicial, proveniente de la rapidez relativa de los procesos físico-químicos agrupados en el término fuente de las ecuaciones de balance (A.21), como lo son las reacciones y los procesos de transferencia de calor por reacción o a través de un medio externo con temperatura uniforme T_w . Es decir, en esta clase de reactores la separación de escalas de variación se da por la convivencia de procesos rápidos con procesos lentos.

El método de reducción de modelo de (Countou-Carrere y Daoutidis, 2008) está consiste en 5 pasos fundamentales:

1. Normalización (escalamiento) de las ecuaciones diferenciales parciales para obtener la forma adimensional del modelo:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{t}} = -\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{z}} + \mathcal{V}(\bar{u}) \mathbf{r}(\bar{u}) \quad (\text{A.22})$$

2. Identificación del parámetro singular ε y separación de las reacciones químicas y procesos de intercambio de calor rápidos y lentos.

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{t}} = -\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{z}} + \frac{1}{\varepsilon_s} \mathcal{V}_s(\bar{u}) \mathbf{r}_s(\bar{u}) + \frac{1}{\varepsilon_f} \mathcal{V}_f(\bar{u}) \mathbf{r}_f(\bar{u}) \quad (\text{A.23})$$

3. Obtención de las ecuaciones diferenciales ordinarias en términos del parámetro carac-

terístico del sistema original mediante el método de características.

$$\frac{d\bar{u}}{d\sigma} = \frac{1}{\varepsilon_s} \mathcal{V}_s(\bar{u}) \mathbf{r}_s(\bar{u}) + \frac{1}{\varepsilon_f} \mathcal{V}_f(\bar{u}) \mathbf{r}_f(\bar{u}) \quad (\text{A.24})$$

4. Reducción del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias basada en perturbaciones singulares y obtención de la ecuación del conjunto invariante que describe el efecto de las reacciones rápidas en el modelo reducido.

$$\frac{d\bar{u}}{d\sigma} = \frac{1}{\varepsilon_s} \mathcal{V}_s(\bar{u}) \mathbf{r}_s(\bar{u}) + \mathcal{V}_f(\bar{u}) \mathbf{r}_R \quad (\text{A.25a})$$

$$0 = \mathbf{r}_f(\bar{u}) \quad (\text{A.25b})$$

$$\mathbf{r}_R = \lim_{\varepsilon_f \rightarrow 0} \frac{\mathbf{r}_f(\bar{u})}{\varepsilon_f} = - \left[\frac{\partial \mathbf{r}_f}{\partial \bar{u}} \mathcal{V}_f(\bar{u}) \right]^{-1} \left[\frac{\partial \mathbf{r}_f}{\partial \bar{u}} \left(\frac{1}{\varepsilon_s} \mathcal{V}_s(\bar{u}) \mathbf{r}_s(\bar{u}) \right) \right] \quad (\text{A.25c})$$

5. Reformulación del modelo reducido en el dominio espacial y temporal. Es decir, el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias reducido de las superficies características del sistema es utilizado para deducir el sistema de ecuaciones diferenciales parciales reducido, en el cual la rigidez debido a las reacciones rápidas del sistema es eliminada.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} &= - \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{z}} + \frac{1}{\varepsilon_s} \mathcal{V}_s(\bar{u}) \mathbf{r}_s(\bar{u}) - \mathcal{V}_f(\bar{u}) \left[\frac{\partial \mathbf{r}_f}{\partial \bar{u}} \mathcal{V}_f(\bar{u}) \right]^{-1} \left[\frac{\partial \mathbf{r}_f}{\partial \bar{u}} \left(\frac{1}{\varepsilon_s} \mathcal{V}_s(\bar{u}) \mathbf{r}_s(\bar{u}) \right) \right] \\ 0 &= \mathbf{r}_f(\bar{u}) \end{aligned} \quad (\text{A.26a})$$

La efectividad del método se demuestra en el estudio de (Countou-Carrere y Daoutidis, 2008) en el que se deduce un control robusto con baja sensibilidad a errores de modelado a partir del modelo reducido (A.26) contrario al desempeño pobre mostrado por el controlador deducido a partir del modelo completo (A.21), que incluso lleva a la inestabilidad al sistema de lazo cerrado debido a la acción de control grande que se suscita al tratar de compensar los errores de modelado en algunos parámetros, magnificados por la alta sensibilidad del modelo completo.

A.2.3. Métodos de discretización espacial de orden reducido.

Son técnicas que aproximan el comportamiento dinámico de una clase de sistemas de dimensión infinita con un sistema de dimensión finita reducida o mínima basadas principalmente en la teoría de perturbaciones singulares y el teorema de la variedad central. El modelo en parámetros concentrados puede ser utilizado para diseñar un controlador de dimensión finita que sea capaz de estabilizar un sistema de dimensión infinita como se reporta en la literatura (Balas (1982), Curtain (1985), Sakawa (1983)). Así mismo, existen pruebas de estabilidad para sistemas lineales y una clase de sistemas no lineales de dimensión infinita acoplados con un controlador de dimensión finita (Balas, 1991). No obstante, algunos de los

métodos obtienen modelos dinámicos de dimensión relativamente alta, de tal manera que durante la implementación del control surgen problemas importantes como el "mal condicionamiento" del sistema de ecuaciones algebraicas que hacen irresoluble en tiempo real el cálculo de las ganancias del controlador en ciertas regiones de operación.

Ésta clase de métodos de reducción de modelo han probado ser efectivos para síntesis de controladores de sistemas distribuidos representados mediante ecuaciones diferenciales parciales disipativas, los cuales tienen la propiedad esencial de que su comportamiento asintótico puede ser descrito por la evolución temporal en un atractor de dimensión finita baja (Christofides, 1998; Christofides y Daoutidis, 1996). El tipo de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales comúnmente encontradas en la literatura tienen la siguiente representación de estados:

$$\frac{du}{dt} = \mathbf{G}(u) \quad (\text{A.27})$$

donde u es un elemento del espacio de Hilbert y $G(u)$ es un operador no lineal suave.

Una subclase de este tipo de sistemas distribuidos analizada ampliamente en la literatura son los sistemas dinámicos donde el transporte convectivo, el transporte difusivo y las reacciones químicas y físicas coexisten en una estructura generalizada obtenida a partir de las ecuaciones (A.15) y (A.16):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathbf{D}(u, z, t) \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \mathbf{C}(u, z, t) \frac{\partial u}{\partial z} + \mathbf{R}(u, z, t) \quad (\text{A.28})$$

El sistema de ecuaciones diferenciales parciales de segundo grado representado en la ec. (A.28) es *cuasilineal* porque los coeficientes de las derivadas espaciales (\mathbf{D}, \mathbf{F}) dependen de u . Si dichos coeficientes no dependen de u el sistema es *semilineal* debido a que la no linealidad del sistema proviene únicamente del término fuente $\mathbf{R}(u, z, t)$.

El lado derecho de la ecuación (A.27) es reemplazado por una aproximación local alrededor de un estado estacionario provista por una serie de Taylor truncada:

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{A}\mathbf{v} + \mathbf{g}(\mathbf{v}) \quad (\text{A.29})$$

donde $\mathbf{A} = \frac{\partial G(u_c)}{\partial u}$ es la linealización del operador \mathbf{G} en el estado de equilibrio u_c , \mathbf{g} es un operador no lineal suave y $\mathbf{v} = u - u_c$. El punto clave para la reducción de estados está en la estructura y distribución del espectro del operador lineal \mathbf{A} , en el cual los modos o eigenvalores críticos (los inestables y los más cercanos al eje imaginario, incluidos los ubicados exactamente en el eje imaginario) se encuentran separados de los modos estables más rápidos por un espacio considerable en el plano complejo. En consecuencia, los cambios en la propiedad de estabilidad están determinados únicamente por un número finito de modos "activos" o críticos. A fin de determinar qué modos pueden ser considerados críticos para el modelo original, es necesario resolver problema de los eigenvalores para el operador lineal \mathbf{A} y determinar si el número de modos críticos es finito. La interpretación geométrica en el espacio de estados recae en la división de la evolución temporal en dos partes: primero, el rápido

avance hacia una variedad (región) de atracción de dimensión finita debido a la negatividad de las partes reales de los modos estables del operador \mathbf{A} y segundo, el comportamiento dinámico a largo plazo que evoluciona dentro de la región de atracción.

Todos los métodos propuestos realizan una proyección del espacio de estados sobre un espacio funcional lineal infinito donde las funciones base dependen explícitamente de la variable espacial y los coeficientes son las amplitudes que dependen exclusivamente del tiempo.

$$\mathbf{v}(t, z) = \mathbf{v}_c(t, z) + \mathbf{v}_s(t, z) = \sum_{i=1}^{n_c} v_i(t) \varphi_i(z) + \sum_{i=n_c+1}^{\infty} v_i(t) \varphi_i(z) \quad (\text{A.30})$$

Posteriormente, empleando argumentos de perturbaciones singulares (teorema de Tikhonov) o del teorema de la variedad central se deduce un modelo dinámico de dimensión finita que describe la evolución temporal de las amplitudes de las funciones base críticas y por lo tanto la evolución de las dinámicas dominantes del sistema original:

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{V}); \mathbf{V} = [v_1, v_2, \dots, v_{n_c}] \in \mathbb{R}^{n_c} \quad (\text{A.31})$$

Esta metodología implica tres puntos de decisión que dan lugar a la diversidad de métodos encontrados en la literatura:

1. Elegir el tipo de funciones base que mejor describan los perfiles espaciales del modelo original:
 - Polinomios de Lagrange.
 - Polinomios de Legendre.
 - Polinomios de Chebychev.
 - Funciones Trigonométricas.
 - Splines (polinomios a trozos).
 - Wavelets.
2. Determinar el número de funciones mínimo necesario para reproducir la dinámica esencial del sistema original.
3. Seleccionar el método para construir el sistema reducido. Existen diversas formulaciones basadas en métodos de discretización espacial reportadas en la literatura:
 - Métodos de los residuos ponderados: Galerkin, Rayleigh-Ritz y Elemento Finito.
 - Diferencias Finitas: Métodos de múltiples mallas espaciales (Multigrid methods).
 - Volumen Finito.

Tres teorías matemáticas son la base de este conjunto de métodos y de acuerdo a ellas se clasifican:

1. *Reducción de modelo basado en la Teoría de la Variedad Central.*

Mediante una transformación lineal se descompone el espacio funcional de la ecuación (A.29) en el espacio de los modos estables y el de los modos críticos: $\mathbf{E} = \mathbf{E}_s \oplus \mathbf{E}_c$.

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{v}}_c &= \mathbf{A}_c \mathbf{v}_c + \mathbf{g}_c(\mathbf{v}_c + \mathbf{v}_s) \\ \dot{\mathbf{v}}_s &= \mathbf{A}_s \mathbf{v}_s + \mathbf{g}_s(\mathbf{v}_c + \mathbf{v}_s)\end{aligned}\tag{A.32}$$

donde $\mathbf{g}_c = T_c \mathbf{g}$ y $\mathbf{g}_s = T_s \mathbf{g}$ se obtuvieron a partir de la transformación de estados: $\begin{bmatrix} \mathbf{v}_c \\ \mathbf{v}_s \end{bmatrix} = T \mathbf{v}$ con T particionada: $T = \begin{bmatrix} T_c \\ T_s \end{bmatrix}$ siendo $T_s = I - T_c$.

Las matrices \mathbf{A}_c y \mathbf{A}_s son particiones de la matriz \mathbf{A} transformada: $\begin{bmatrix} \mathbf{A}_c \\ \mathbf{A}_s \end{bmatrix} = T \mathbf{A} T^{-1}$.

Dado el sistema (A.32) se supone la existencia de una variedad invariante suave llamada variedad central definida: $\mathbf{v}_s = \mathbf{h}(\mathbf{v}_c)$ que cumple que $\mathbf{h}(0) = \mathbf{h}'(0) = 0$ y en la cual el comportamiento asintótico del sistema original está descrito por el sistema reducido:

$$\dot{\mathbf{v}}_c = \mathbf{A}_c \mathbf{v}_c + \mathbf{g}_c(\mathbf{v}_c + \mathbf{h}(\mathbf{v}_c))\tag{A.33}$$

Así mismo, el Teorema de la Variedad Central (Steindl y Troger, 2001), (Guckenheimer y Holmes, 1983) garantiza que el estado de equilibrio del sistema de la ec. (A.33) tiene exactamente las mismas propiedades locales de estabilidad que el estado de equilibrio del sistema original expresado en la ec. (A.29).

2. *Reducción de modelo basado en la Teoría de la Variedad Inercial.*

El tratamiento algebraico del sistema linealizado original de la ec. (A.29) es análogo al realizado por los métodos basados en el teorema de la variedad central: se lleva al sistema a la forma estándar de la ec. (A.32) mediante una transformación lineal de estados y se realiza una reducción del modelo seleccionando un número de modos críticos, sin embargo, la teoría de la variedad inercial, no requiere que existan eigenvalores del operador lineal \mathbf{A} en el eje imaginario del plano complejo, debido a que es una generalización del teorema de la variedad central para sistemas de dimensión infinita (Guckenheimer y Holmes, 1983). Por lo tanto, se supone la existencia de un conjunto invariante suave, global y exponencialmente atractiva, de dimensión finita a la que converge el comportamiento a largo plazo del modelo original. El uso de los modelos reducidos obtenidos para la síntesis de controladores es extendido como se evidencia en la revisión realizada por Shvartsman y Kevrekidis (1998).

3. *Reducción de modelo basado en la Teoría de Perturbaciones Singulares.*

El sistema original (ecuación linealizada A.29 o ecuación no lineal A.27) es llevado a la forma estándar general de perturbaciones singulares mediante una transformación

de variables:

$$\frac{d\mathbf{v}_l}{dt} = \mathbf{b}(\mathbf{v}_r, \mathbf{v}_l) \quad (\text{A.34})$$

$$\varepsilon \frac{d\mathbf{v}_r}{dt} = \mathbf{k}(\mathbf{v}_r, \mathbf{v}_l) \quad (\text{A.35})$$

donde \mathbf{v}_r es el vector de estados cuya dinámica es rápida y \mathbf{v}_l es el vector de estados de dinámica lenta. El parámetro de perturbación ε es muy pequeño, lo cual tiene como consecuencia que el comportamiento asintótico del sistema original pueda ser descrito por un modelo reducido de la evolución temporal de los estados lentos en una variedad invariante \mathbf{f} tal que: $\mathbf{v}_r = \mathbf{f}(\mathbf{v}_l)$.

$$\frac{d\mathbf{v}_l}{dt} = \mathbf{b}(\mathbf{v}_l, \mathbf{f}(\mathbf{v}_l)) \quad (\text{A.36})$$

En el libro de Kokotovic *et al.* (1999) se recuperan varias estrategias de control basadas en la teoría de perturbaciones singulares para sistemas de dimensión finita. Resulta imprescindible destacar el diseño de un controlador robusto compuesto para un sistema de dimensión finita en el que se calculen de manera separada las ganancias para la dinámica rápida por una parte y para la dinámica lenta por otra. En (Christofides y Daoutidis, 1996) y (Christofides y Daoutidis, 1997) se extiende el trabajo de Kokotovic *et al.* (1999) para sistemas de dimensión infinita con el objetivo de diseñar un controlador basado en observador no lineal utilizando el modelo reducido mediante perturbaciones singulares y mostrar su desempeño.

Apéndice B

Teoría de perturbaciones.

El enfoque de la teoría de perturbaciones consiste en obtener una versión simplificada o reducida de un modelo matemático complejo, aprovechando el carácter pequeño de un parámetro del sistema. Un análisis dimensional previo en el que se comparan las cantidades y los términos de las ecuaciones (efectos de los diferentes procesos físico-químicos en los balances de masa, energía y momentum) permite la identificación del parámetro pequeño que es considerado como una perturbación del sistema. Las técnicas de perturbaciones no sólo proveen un modelo más simple y tratable llamado modelo nominal, al despreciar el efecto de la perturbación, sino que analizan y evalúan la validez de los mismos en relación con el modelo original mediante estimaciones del error en las aproximaciones. Adicionalmente, dichos métodos proporcionan una serie de correcciones sucesivas al modelo nominal, en el que se incluye la influencia del parámetro de perturbación, obteniendo nuevos modelos reducidos con un error de aproximación menor en varios órdenes de magnitud .

El análisis asintótico forma los fundamentos de la teoría de perturbaciones y por lo tanto de los esquemas de reducción de modelo aquí tratados. Es por ello que resulta útil para nuestro propósito presentar un resumen general de los conceptos y teoremas básicos de dichos métodos de análisis para sistemas dinámicos de dimensión finita (problemas de condición inicial), en vista de que las ideas fundamentales expuestas se extienden de manera natural a sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias con valor a la frontera y sistemas de parámetros distribuidos modelados con ecuaciones diferenciales parciales (Naidu, 1988; Kevorkian y Cole, 1996).

El punto de partida del análisis asintótico y la teoría de perturbaciones es la representación en espacio de estados del modelo:

$$\dot{x} = f(t, x, \varepsilon) \tag{B.1}$$

$$x(t_0) = \sigma(\varepsilon) \tag{B.2}$$

donde ε es un parámetro del modelo cuyo valor es significativamente pequeño y es considerado un parámetro de perturbación cuyo efecto en el comportamiento del sistema dinámico

es el principal interés de los métodos de perturbaciones. La solución del sistema de EDOs de valor inicial (B.1) se denota como $x(t, \varepsilon)$.

El modelo original (B.1) es llamado sistema perturbado por el parámetro pequeño ε y el modelo que surge de anular el efecto de ε se conoce como modelo nominal o no perturbado:

$$\dot{x}_0 = f(t, x, 0) \quad (\text{B.3})$$

$$x_0(t_0) = \sigma(0) \quad (\text{B.4})$$

El enfoque de perturbaciones consiste en estudiar la influencia de la perturbación ε de forma indirecta, partiendo del modelo nominal (B.3) y evaluar si existen cambios cualitativos importantes en sus propiedades estructurales al incluir el efecto de ε en el modelo perturbado mediante aproximaciones sucesivas basadas en series asintóticas (Murdock, 1999).

Específicamente, el objetivo de todo método asintótico es deducir una solución aproximada $\tilde{x}(t, \varepsilon)$, tal que alguna norma del error de la aproximación sea del orden de una potencia de ε y el modelo correspondiente a la solución aproximada $\tilde{x}(t, \varepsilon)$ sea más simple que el original.

A continuación se enumeran algunas definiciones que ayudan a entender y evaluar la efectividad del método de aproximación asintótico (Holmes, 2013):

- Notación de Orden 1. Se dice que una función $f(\varepsilon)$ es del orden de o de menor orden que $g(\varepsilon)$ y es escrito como $d(\varepsilon) = O(q(\varepsilon))$ cuando

$$\|d(\varepsilon)\| \leq k \|q(\varepsilon)\|, \quad \forall |\varepsilon| < c \quad \text{alternativamente} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\|d(\varepsilon)\|}{\|q(\varepsilon)\|} = k$$

- Notación de Orden 2. Se dice que una función $d(\varepsilon)$ es de menor orden de $q(\varepsilon)$ estrictamente y es escrito como $d(\varepsilon) = o(q(\varepsilon))$ cuando

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\|d(\varepsilon)\|}{\|q(\varepsilon)\|} = 0$$

- Definición 1: Secuencia asintótica. Una secuencia de funciones del parámetro de perturbación $\{\phi_n(\varepsilon)\}$ para $n = 0, 1, 2, \dots$ es llamada asintótica si conforme $\varepsilon \rightarrow 0$ se cumple que:

$$\phi_{n+1}(\varepsilon) = o(\phi_n(\varepsilon)), \quad \forall n$$

- Definición 2: Serie asintótica. Una expansión de la función $d(\varepsilon)$ en términos de la secuencia asintótica de funciones $\{\phi_n(\varepsilon)\}$ es asintótica si conforme $\varepsilon \rightarrow 0$ se cumple que:

$$d(\varepsilon) = \sum_{n=0}^N a_n \phi_n(\varepsilon) + o(\phi_N(\varepsilon)), \quad \forall N$$

En el contexto de la teoría de perturbaciones, el análisis asintótico explota la pequeñez del parámetro de perturbación ε mediante la expansión de la solución exacta $x(t, \varepsilon)$ en series asintóticas de funciones de dicho parámetro.

La expansión de $x(t, \varepsilon)$ en serie de potencias de Taylor alrededor de $\varepsilon = 0$:

$$x(t, \varepsilon) = \sum_{n=0}^{N-1} x_n(t) \varepsilon^n + \varepsilon^N R_x(t, \varepsilon); \quad x_n(t) = \left. \frac{\partial^n x(t, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^n} \right|_{\varepsilon=0} \quad (\text{B.5})$$

es una serie asintótica usada extensamente en los métodos de perturbación debido a que ha probado ser particularmente efectiva bajo las siguientes condiciones:

- El modelo nominal (B.3) es mucho más simple que el perturbado (B.1).
- El parámetro de perturbación ε es lo suficientemente pequeño para poder deducir una aproximación de pocos términos (bajo orden).

Si se trunca la serie de Taylor a partir del N -ésimo término entonces se obtiene la solución aproximada del modelo completo:

$$\tilde{x}(t, \varepsilon) = \sum_{n=0}^{N-1} x_n(t) \varepsilon^n \quad (\text{B.6})$$

Adicionalmente, se plantea una serie análoga para las condiciones iniciales bajo las mismas consideraciones:

$$\sigma(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{N-1} \sigma_n \varepsilon^n + \varepsilon^N R_\sigma(\varepsilon); \quad \sigma_n = \left. \frac{\partial^n \sigma(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^n} \right|_{\varepsilon=0} \quad (\text{B.7})$$

Es necesario ahora determinar las funciones $x_0(t), x_1(t), \dots, x_{N-1}(t)$, componentes de la solución aproximada para lo cual se construye el conjunto de modelos simplificados correspondiente mediante el siguiente procedimiento (Khalil, 2002):

1. Sustitución de la ecuación (B.5) en el modelo original (B.1):

$$\sum_{n=0}^{N-1} \dot{x}_n(t) \varepsilon^n + \varepsilon^N \dot{R}_x(t, \varepsilon) = f(t, x(t, \varepsilon), \varepsilon) = k(t, \varepsilon) \quad (\text{B.8})$$

2. Obtención de la serie asintótica de Taylor del campo vectorial $f(t, x, \varepsilon)$:

$$k(t, \varepsilon) = \sum_{n=0}^{N-1} k_n(t) \varepsilon^n + \varepsilon^N R_k(t, \varepsilon); \quad k_n(t) = \left. \frac{\partial^n f(t, x, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^n} \right|_{\varepsilon=0} \quad (\text{B.9})$$

3. Igualación de los coeficientes con potencias iguales de ambos lados de la ecuación:

$$\sum_{n=0}^{N-1} \dot{x}_n(t) \varepsilon^n + \varepsilon^N \dot{R}_x(t, \varepsilon) = \sum_{n=0}^{N-1} k_n(t) \varepsilon^n + \varepsilon^N R_k(t, \varepsilon) \quad (\text{B.10})$$

Por lo tanto, el modelo completo del sistema (B.1) se aproxima mediante un conjunto de N modelos más simples

1.

$$\dot{x}_0 = k_0(t) = f(t, x_0, 0) \quad (\text{B.11})$$

$$\dot{x}_1 = k_1(t) = \left. \frac{\partial f(t, x, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \quad (\text{B.12})$$

\vdots

$$\dot{x}_{N-1} = k_{N-1}(t) = \left. \frac{\partial^{N-1} f(t, x, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^{N-1}} \right|_{\varepsilon=0} \quad (\text{B.13})$$

con las condiciones iniciales siguientes:

$$x_0(t_0) = \sigma_0 = \sigma(0), \quad (\text{B.14})$$

$$x_1(t_0) = \sigma_1 = \left. \frac{\partial \sigma(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0}, \quad (\text{B.15})$$

\vdots

$$x_{N-1}(t_0) = \sigma_{N-1} = \left. \frac{\partial^{N-1} \sigma(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^{N-1}} \right|_{\varepsilon=0} \quad (\text{B.17})$$

Cabe señalar que para el caso de la aproximación asintótica más simple ($N = 1$) el modelo aproximado corresponde al sistema nominal de la ecuación (B.3).

Desarrollando las derivadas de f con respecto a ε se revela una estructura triangular

generalizada:

$$\dot{x}_0 = f(t, x_0, 0), \quad x_0(t_0) = \sigma(0), \quad (\text{B.18})$$

$$\dot{x}_1 = A(t)x_1 + g_1(t, x_0(t)), \quad x_1(t_0) = \sigma_1, \quad (\text{B.19})$$

$$\dot{x}_2 = A(t)x_2 + g_2(t, x_0(t), x_1(t)), \quad x_2(t_0) = \sigma_2, \quad (\text{B.20})$$

⋮

$$\dot{x}_{N-1} = A(t)x_{N-1} + g_{N-1}(t, x_0(t), x_1(t), \dots, x_{N-2}(t)), \quad x_{N-1}(t_0) = \sigma_{N-1}, \quad (\text{B.21})$$

donde $A(t)$ es el jacobiano $(\frac{\partial f}{\partial x})$ evaluado en $x = x_0(t)$ y $\varepsilon = 0$ y el término no lineal $g_k(t, x_0(t), x_1(t), \dots, x_{k-1}(t))$ es una función polinomial en $x_0(t), x_1(t), \dots, x_{k-1}(t)$ con coeficientes que dependen continuamente de t y $x_0(t)$. A partir de esta estructura, se concluye que propiedades fundamentales como la unicidad y estabilidad de las soluciones $x_1(t), x_2(t), \dots, x_{N-1}(t)$ y por lo tanto de la aproximación están determinadas por el modelo nominal.

De acuerdo a éste hecho, la teoría de perturbaciones (Khalil, 2002; Hoppensteadt, 1971) establece bajo qué condiciones la aproximación $\tilde{x}(t, \varepsilon)$ es válida, es decir, el error de la aproximación está acotado por una función del parámetro ε .

- Validez en un intervalo finito. Si el sistema dinámico completo (B.1) tiene una solución única $x(t, \varepsilon)$, definida en un intervalo del dominio temporal $t = [t_0, t_1]$, entonces el error de la aproximación asintótica (B.6) es $O(\varepsilon^N)$ uniforme en un intervalo finito $t = [t_0, t_1]$ si el modelo nominal (B.3) tiene solución única definida en $x_0(t) \in D$ para todo el intervalo $t = [t_0, t_1]$ y se cumplen un conjunto de condiciones de suavidad de las funciones involucradas:

1. $f, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \dots, \frac{\partial^N f}{\partial x^N}, \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^2}, \dots, \frac{\partial^N f}{\partial \varepsilon^N}$ son continuas en (t, x, ε) para $(t, x, \varepsilon) \in [t_0, t_1] \times D \times [-\varepsilon_0, \varepsilon_0]$
2. $\sigma, \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \varepsilon^2}, \dots, \frac{\partial^N \sigma}{\partial \varepsilon^N}$ son continuas en ε para $\varepsilon \in [-\varepsilon_0, \varepsilon_0]$

- Validez en todo el dominio del tiempo. El modelo original (B.1) tiene una solución única $x(t, \varepsilon)$, uniformemente acotada en $[t_0, \infty)$, y el error de la aproximación asintótica (B.6) es $O(\varepsilon^N)$ uniforme $\forall t \geq t_0$ si el origen es un punto de equilibrio exponencialmente estable del modelo nominal (B.3) y se cumplen el conjunto de condiciones de suavidad:

1. $f, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \dots, \frac{\partial^N f}{\partial x^N}, \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^2}, \dots, \frac{\partial^N f}{\partial \varepsilon^N}$ son continuas y acotadas en (t, x, ε) para $(t, x, \varepsilon) \in [t_0, t_1] \times D_0 \times [-\varepsilon_0, \varepsilon_0]$ para todo conjunto compacto $D_0 \subset D$.
2. $\sigma, \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \varepsilon^2}, \dots, \frac{\partial^N \sigma}{\partial \varepsilon^N}$ son continuas en ε para $\varepsilon \in [-\varepsilon_0, \varepsilon_0]$
3. Si $N = 1$ el jacobiano del sistema es Lipschitz en (x, ε) , uniforme en t .

Es importante resaltar el carácter conservativo de los resultados anteriores debido a que las condiciones son sólo suficientes y no necesarias para que el error de la aproximación esté acotado de forma uniforme tanto en el intervalo finito como en el intervalo infinito del dominio del tiempo. Es decir, se garantiza que la aproximación asintótica (B.6) es válida en un cierto intervalo de tiempo si se cumplen éstas condiciones, sin embargo, puede ocurrir que la aproximación sea válida aunque no se cumplan una o todas las condiciones.

Por otra parte, existen modelos para los cuales el acotamiento del error de sus aproximaciones asintóticas no es uniforme en todo el dominio (intervalo finito o infinito) y crece en sólo algún subconjunto del mismo. Esta clase de sistemas son conocidos como modelos de perturbaciones irregulares ó singulares ya que el comportamiento del modelo completo cuando $\varepsilon = 0$ es cualitativamente distinto a cuando $0 < \varepsilon \leq \varepsilon_0$. En consecuencia, un conjunto de conceptos y métodos de perturbaciones han sido desarrollados a fin de extender el análisis asintótico de las perturbaciones regulares a problemas de perturbaciones singulares.

La siguiente sección se dedica a los fundamentos de los métodos de perturbaciones singulares debido a que éstos constituyen la base de gran parte de los esquemas de reducción y simplificación de modelo aplicados en ingeniería de procesos.

B.1. Perturbaciones singulares.

El origen de la teoría de perturbaciones singulares se debe al trabajo revolucionario de Anders Lindstedt, Henri Poincaré y Ludwig Prandtl. Lindstedt desarrolló un método para obtener una aproximación asintótica uniforme de las soluciones periódicas de ecuaciones diferenciales que describen la mecánica de los cuerpos celestes y donde los métodos de perturbaciones regulares habían fallado. Motivado por el estudio de (Lindstedt, 1882) sobre aproximaciones uniformes de soluciones periódicas de ecuaciones diferenciales que describen la mecánica celeste, (Poincaré, 1892) introdujo la definición de series asintóticas (series divergentes en el sentido clásico) y descubrió que para obtener una aproximación uniforme mediante el método de perturbaciones es necesario obtener series asintóticas en al menos dos diferentes escalas de tiempo. Las aportaciones del análisis asintótico no sólo fueron fundamentales para entender la sensibilidad de los sistemas dinámicos a ciertos parámetros sino también a pequeños cambios en las condiciones iniciales, propiciando el nacimiento de la teoría del caos. (Prandtl, 1905) propuso el concepto de capa límite para explicar las paradojas del flujo viscoso de un fluido a través de un sólido con un número de Reynolds alto. En su trabajo Prandtl, divide el espacio (dominio de las EDPs) donde se desarrolla el movimiento del fluido en dos partes: (i) una capa delgada de transición adyacente a la superficie del sólido donde la fricción domina, y (ii) el espacio fuera de la capa donde el flujo es libre de viscosidad. La interacción de la capa límite con el espacio libre

determinan el comportamiento del sistema y son descritas por ecuaciones considerablemente más simples computacional y analíticamente que el modelo original (modelo de Navier-Stokes). Las contribuciones del método de capa límite son invaluable en el campo de la dinámica de fluidos y en particular, en la aerodinámica.

La dependencia discontinua del modelo perturbado o completo en el parámetro de perturbación pequeño ε , en particular, cuando éste se anula es analizado mediante métodos de perturbaciones singulares. Los fuertes cambios del modelo en relación al parámetro singular pequeño se deben a las interacciones de las variables del modelo en escalas de tiempo y espacio (en el caso de EDPs) muy diferentes, es decir, poseen una estructura de múltiples escalas subyacente. Es por ello que para evitar la divergencia de la aproximación asintótica se analiza la respuesta del sistema en las diferentes escalas de variación de forma separada. El método de las variables elongadas de Poicaré-Lindstedt constituye el primer método de múltiples escalas en el que dos escalas de tiempo son aproximadas mediante dos series asintóticas diferentes (Dejager y Furu, 1996).

En consecuencia, todos los métodos de perturbaciones singulares pueden ubicarse en el contexto del análisis de múltiples escalas basado en series asintóticas, pues éste constituye una teoría y marco general de modelado que permite discernir las variables (o fenómenos) del modelo completo que tienen un papel dominante en el comportamiento dinámico local y global del sistema y por lo tanto obtener un modelo reducido que herede propiedades estructurales del completo.

A continuación se proporcionan los conceptos y herramientas que comprenden un análisis y reducción de modelo basado en la forma estándar de perturbaciones singulares siguiendo el tratamiento introductorio provisto en (Khalil, 2002). Este método es aplicable de forma relativamente sencilla a sistemas que tienen capa límite inicial y de frontera que exhiben una estructura relativamente definida de múltiples escalas.

El punto de partida del análisis estándar de perturbaciones singulares consiste en llevar al sistema dinámico a la forma o modelo estándar en el que las derivadas de algunos estados están multiplicadas por el parámetro pequeño ε de perturbación:

$$\dot{x} = f(t, x, z, \varepsilon), \quad x(t_0) = \xi(\varepsilon), \quad x \in \mathbb{R}^n \quad (\text{B.22})$$

$$\varepsilon \dot{z} = g(t, x, z, \varepsilon), \quad z(t_0) = \eta(\varepsilon), \quad z \in \mathbb{R}^m \quad (\text{B.23})$$

El cambio cualitativo significativo de este modelo surge en el modelo nominal sin perturbación: $\varepsilon = 0$ ya que la dimensión del sistema se reduce de $n + m$ estados (número de ODEs) a n debido a que el conjunto de ecuaciones diferenciales definidas en (B.23) degeneran en un conjunto de ecuaciones algebraicas como sigue:

$$\dot{x} = f(t, x, z, 0), \quad x(t_0) = \xi(0) = \xi_0 \quad (\text{B.24})$$

$$0 = g(t, x, z, 0) \quad (\text{B.25})$$

Se dice que el modelo completo (B.22)-(B.23) se encuentra en la forma estándar definida si el sistema de ecuaciones algebraicas (B.25) tiene $k \geq 1$ soluciones reales aisladas:

$$z_i = h_i(t, x), \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (\text{B.26})$$

Por lo tanto, a cada solución algebraica z_i le corresponde un modelo de orden reducido tras sustituir dicha raíz en el subsistema (B.24) de la siguiente forma:

$$\dot{x}_i = f(t, x_i, h_i(t, x_i), 0), \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (\text{B.27})$$

Este sistema es conocido como modelo de estado cuasiestacionario o modelo lento ya que captura las variaciones lentas dominantes del sistema agrupadas y manifestadas en x , a diferencia de los estados z cuya velocidad g/ε puede ser muy grande cuando ε es pequeño haciendo que éstos convergan rápidamente a una solución de (B.25), el cual es un equilibrio asintóticamente estable de (B.23).

La solución de la ecuación (B.27) denotada por $\bar{x}(t)$ es una aproximación válida uniformemente en un intervalo del dominio:

$$x(t, \varepsilon) - \bar{x}(t) = O(\varepsilon), \quad \forall t \in [t_0, t_1]$$

Mientras que la solución algebraica de la ecuación (B.26) denotada por $\bar{z}(t)$ es una aproximación válida uniformemente en un intervalo del dominio que no incluye al tiempo inicial t_0 :

$$z(t, \varepsilon) - \bar{z}(t) = O(\varepsilon), \quad \forall t \in [t_\varepsilon, t_1]$$

donde $t_\varepsilon > t_0$ debido a que $z(t_0, \varepsilon) - \bar{z}(t_0) \neq O(\varepsilon)$ al contrario de lo que ocurre para las variables lentas x .

En consecuencia, las variables z tienen un período de variación rápido $[t_0, t_\varepsilon]$ llamado capa límite o capa inicial en el cual la variable z se acerca asintóticamente a \bar{z} . Con el objetivo de obtener un estimado uniforme de la desviación $z - \bar{z}$ que ocurre en

el intervalo de tiempo corto $[t_0, t_\varepsilon]$ de la capa límite se reescribe el modelo completo (B.22)-(B.23) en términos de dicha desviación denotada como $\hat{z}(t)$ y se escala la variable independiente t :

$$\frac{dx}{d\tau} = \varepsilon f(t, x, \hat{z} + h(t, x), \varepsilon), \quad x(t_0) = \xi(\varepsilon) \quad (\text{B.28})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{z}}{d\tau} &= g(t, x, \hat{z} + h(t, x), \varepsilon) - \varepsilon \frac{\partial h}{\partial t} - \varepsilon \frac{\partial h}{\partial x} f(t, x, \hat{z} + h(t, x), \varepsilon), \\ \hat{z}(t_0) &= \eta(\varepsilon) - h(t_0, \xi(\varepsilon)) \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

$$\hat{z}(t) = z(t, \varepsilon) - h(t, x), \quad \tau = \frac{t - t_0}{\varepsilon}, \quad \frac{d\tau}{dt} = \frac{1}{\varepsilon} \quad (\text{B.30})$$

donde τ se reconoce como la variable del tiempo alargada debido a que conforme $\varepsilon \rightarrow 0$ entonces $\tau \rightarrow \infty$ para tiempo finito t .

Tal representación confirma el papel de x , t y a su vez $\bar{z} = h(t, x)$ como variables lentas en la escala de tiempo τ de acuerdo a las siguientes expresiones:

$$t = t_0 + \varepsilon\tau, \quad x = x(t_0 + \varepsilon\tau, \varepsilon)$$

El modelo nominal ($\varepsilon = 0$) en la escala de tiempo rápida del sistema τ se conoce como modelo de capa límite del sistema perturbado singularmente y está dado por la siguiente expresión:

$$\frac{dx}{d\tau} = 0, \quad x(t_0) = \xi_0 \quad (\text{B.31})$$

$$\frac{d\hat{z}}{d\tau} = g(t, x, \hat{z} + h(t, x), 0), \quad \hat{z}(0) = \eta(0) - h(t_0, \xi_0) \quad (\text{B.32})$$

Dicho modelo evidencia que las variables x y t están fijas en sus valores iniciales o de frontera: $t = t_0$ y $x = x(t_0)$, y por lo tanto este modelo describe únicamente el comportamiento de la componente rápida de z , la cual que permite garantizar una aproximación uniforme de z , es decir,

$$z(t, \varepsilon) = \hat{z}(t) + \bar{z}(t) + O(\varepsilon), \quad \forall t \in [t_0, t_1]$$

La teoría de perturbaciones singulares (Khalil, 2002; Hoppensteadt, 1966) proporciona condiciones suficientes para que la aproximación dada por el modelo reducido y el modelo de capa límite sea uniformemente válida, es decir,

$$x(t, \varepsilon) - \bar{x}(t) = O(\varepsilon) \quad (\text{B.33})$$

$$z(t, \varepsilon) - \hat{z}(t) - h(t, \bar{x}) = O(\varepsilon) \quad (\text{B.34})$$

- Validez en un intervalo finito (Teorema de Tikhonov). El modelo dinámico completo (B.22)-(B.23) tiene una solución única $x(t, \varepsilon)$, $z(t, \varepsilon)$ definida en un intervalo del dominio temporal $t = [t_0, t_1]$ y el error de la aproximación asintótica (B.33)-(B.34) es uniforme en el intervalo finito $t = [t_0, t_1]$ si se cumple el conjunto de condiciones siguiente para todo:

$$[t, x, z - h(t, x), \varepsilon] \in [0, t_1] \times D_x \times D_z \times [0, \varepsilon_0], \quad D_x \subset \mathbb{R}^n, \quad D_z \subset \mathbb{R}^m$$

1. $f, g, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial z}, \frac{\partial g}{\partial x}, \frac{\partial g}{\partial z}, \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial g}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial g}{\partial t}$ son continuas.
 2. $h(t, x), \frac{\partial g(t, x, z, 0)}{\partial z}$ tienen primeras derivadas parciales continuas con respecto a sus argumentos.
 3. El modelo reducido (B.27) tiene solución única definida $\bar{x}(t) \in S \subset D_x$ para $t = [t_0, t_1]$.
 4. El origen ($\hat{z} = 0$) es un punto de equilibrio exponencialmente estable del modelo de capa límite uniforme en los parámetros (t, x) , y $\hat{z}(t_0) \in \Omega_z \subset \mathcal{R}_z$. \mathcal{R}_z es la región de atracción del punto de equilibrio.
- Validez en todo el dominio del tiempo. El modelo original (B.22)-(B.23) tiene una solución única $x(t, \varepsilon)$, $z(t, \varepsilon)$ definida en $[t_0, \infty)$, y el error de la aproximación asintótica es uniforme (B.33)-(B.34) $\forall t \geq t_0$ si el origen es un punto de equilibrio exponencialmente estable del modelo nominal (B.3) si se cumple el conjunto de condiciones siguiente para todo:

$$[t, x, z - h(t, x), \varepsilon] \in [0, \infty) \times D_x \times D_z \times [0, \varepsilon_0], \quad D_x \subset \mathbb{R}^n, \quad D_z \subset \mathbb{R}^m$$

1. $f, g, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial z}, \frac{\partial g}{\partial x}, \frac{\partial g}{\partial z}, \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial g}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial g}{\partial t}$ son continuas y acotadas.
2. $h(t, x), \frac{\partial g(t, x, z, 0)}{\partial z}$ tienen primeras derivadas parciales acotadas con respecto a sus argumentos.
3. $\frac{\partial f(t, x, h(t, x), 0)}{\partial x}$ es Lipschitz en x y uniforme en t .
4. El modelo reducido (B.27) tiene un punto de equilibrio exponencialmente estable cuya región de atracción es un subconjunto compacto de D_x .
5. El origen ($\hat{z} = 0$) es un punto de equilibrio exponencialmente estable del modelo de capa límite (B.31)-(B.32) uniforme en los parámetros (t, x) , y $\hat{z}(t_0) \in \Omega_z \subset \mathcal{R}_z$. \mathcal{R}_z es la región de atracción del punto de equilibrio.

Apéndice C

Modelo dinámico de un RCTA multicomponente de dos fases.

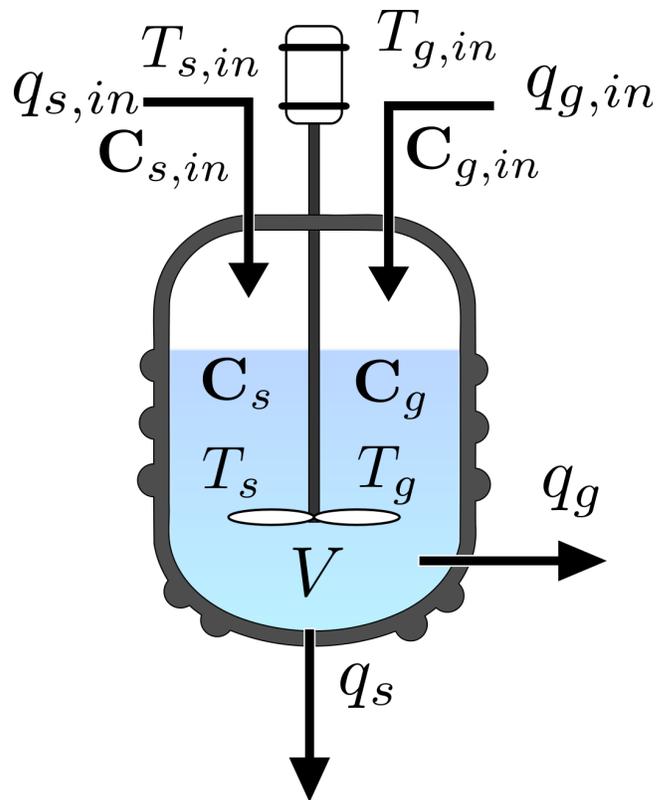


Figura C.1: RCTA multicomponente de dos fases termodinámicas.

En este apéndice se presenta la deducción del modelo dinámico de un reactor continuo de tanque agitado (RCTA) multicomponente y de dos fases (sólido y gas), dado por el conjunto de ecuaciones (C.1).

$$V\dot{\mathbf{C}}_s = q_{s,in}\mathbf{C}_{s,in} - q_s\mathbf{C}_s + \mathcal{G}_s(\mathbf{C}, \mathbf{T})V \quad (\text{C.1a})$$

$$V\dot{T}_s = \left(\frac{C_{s,in}C_{p,in}^s}{C_s C_p^s} \right) (q_{s,in}T_{s,in} - q_s T_s) + \frac{Q^s(\mathbf{C}, \mathbf{T})V}{C_s C_p^s} \quad (\text{C.1b})$$

$$V\dot{\mathbf{C}}_g = q_{g,in}\mathbf{C}_{g,in} - q_g\mathbf{C}_g + \mathcal{G}_g(\mathbf{C}, \mathbf{T})V \quad (\text{C.1c})$$

$$V\dot{T}_g = \left(\frac{C_{g,in}C_{p,in}^g}{C_g C_p^g} \right) (q_{g,in}T_{g,in} - q_g T_g) + \frac{Q^g(\mathbf{C}, \mathbf{T})V}{C_g C_p^g} \quad (\text{C.1d})$$

con las condiciones iniciales:

$$t' = 0 : \quad \mathbf{C}_s(0) = \mathbf{C}_{sic}, \quad T_s(0) = T_{sic}, \quad \mathbf{C}_g(0) = \mathbf{C}_{gic}, \quad T_g(0) = T_{gic} \quad (\text{C.1e})$$

las ecuaciones de balance molar total de ambas fases:

$$\dot{C}_s = q_{s,in}C_{s,in} - q_s C_s + \dot{N}_{g \rightarrow s}(\mathbf{C}, \mathbf{T})V \quad (\text{C.1f})$$

$$\dot{C}_g = q_{g,in}C_{g,in} - q_g C_g + \dot{N}_{s \rightarrow g}(\mathbf{C}, \mathbf{T})V \quad (\text{C.1g})$$

y los términos de generación o fuente de las ecuaciones de conservación están dados por las siguientes expresiones:

$$\mathcal{G}_\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \mathbf{S}_\pi^T \mathcal{R}(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad \pi = s, g \quad (\text{C.1h})$$

$$Q^g(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = - \sum_{j=1}^{NRg} \Delta H_j \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) + \mathcal{A}_{sg} h_{sg}(\mathbf{T})[T_s - T_g] - \mathcal{A}_v h_{gw}(\mathbf{T})[T_g - T_w] \quad (\text{C.1i})$$

$$Q^s(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = - \sum_{j=1}^{NRs} \Delta H_j \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) - \mathcal{A}_{sg} h_{sg}(\mathbf{T})[T_s - T_g] - \mathcal{A}_v h_{sw}(\mathbf{T})[T_s - T_w] \quad (\text{C.1j})$$

$$\mathcal{A}_{sg} = \frac{6(1 - \alpha_g)}{d_p}, \quad \mathcal{A}_v = \frac{4}{D_R} \quad (\text{C.1k})$$

$$\dot{N}_{s \rightarrow g}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \alpha_g \sum_{i=1}^{n_g} \sum_{j=1}^m s_{i,j}^g \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (\text{C.1l})$$

$$\dot{N}_{g \rightarrow s}(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \alpha_s \sum_{i=1}^{n_s} \sum_{j=1}^m s_{i,j}^s \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (\text{C.1m})$$

donde V es el volumen del tanque, $q_{s,in}$ (o $q_{g,in}$) es el flujo entrante de la fase sólida (o gaseosa), q_s (o q_g) es el flujo efluente o de salida de la fase sólida (o gaseosa), \mathbf{C}_s (o \mathbf{C}_g) es el vector que contiene las n_s (o n_g) concentraciones molares aparentes C_i^s (o C_i^g) de los n_s (o n_g) componentes de la fase sólida (o gaseosa), T_s (o T_g) es la temperatura de la

superficie de la partícula sólida (o de la fase gaseosa que rodea a las partículas sólidas), C_s es la concentración molar del sólido (o gas) aparente con respecto al volumen del tanque, \mathcal{R} es el vector de las m velocidades de reacción \mathcal{R}_j , ΔH_j es el cambio de entalpía (o calor de reacción) a la temperatura actual de la fase producido por la j -ésima reacción química, y h_{sg} (o $h_{\pi w}$) es el coeficiente de transferencia de calor entre fases (o entre la pared interna del tanque y la fase π).

El resto de las variables están definidas de acuerdo a la nomenclatura de la tabla 2.4 y a la notación establecida en el modelo distribuido del gasificador tubular (2.4) en la sección 2.5.

La ecuación de balance molar total (C.1g) del gas es utilizada para obtener el flujo effluente de la fase gas del RCTA mediante el siguiente procedimiento:

1. Se emplea la ley de gas ideal para relacionar la concentración molar del gas con la temperatura del gas:

$$P_g V_g = n_g R T_g; \quad C_g = \frac{n_g}{V} = \frac{P_g}{R T_g}; \quad C_{g,in} = \frac{n_{g,in}}{V_{in}} = \frac{P_{g,in}}{R T_{g,in}}$$

2. Derivando esta expresión respecto al tiempo se obtiene una relación entre la dinámica o la variación temporal de la concentración total con la dinámica de la temperatura:

$$\frac{dC_g}{dt'} = -\frac{C_g}{T_g} \frac{dT_g}{dt'}$$

3. Finalmente se sustituye esta expresión en el balance de moles totales del gas (C.1g) obteniendo una expresión para el flujo volumétrico de salida del gas en términos de la dinámica de la temperatura del gas dada por la expresión (C.1d):

$$q_g = \left(\frac{C_{g,in}}{C_g} \right) q_{g,in} + \frac{\dot{N}_{s \rightarrow g} V}{C_g} + \frac{V}{T_g} \frac{dT_g}{dt'}$$

Los balances molares de las especies químicas y de calor que constituyen el modelo dinámico del RCTA multicomponente de dos fases (C.1) son derivadas a partir de las ecuaciones de conservación de masa y energía planteadas en cada fase para el RCTA multicomponente de

acuerdo al conjunto de ecuaciones (C.2).

$$\frac{d(\alpha_s V \rho_s Y_i^s)}{dt'} = \rho_{s,in} q_{s,in} Y_{i,in}^s - \rho_s q_s Y_i^s + W_i^s \mathcal{G}_i^s V, \quad i = 1, \dots, n_s \quad (\text{C.2a})$$

$$\frac{d(\alpha_s V \rho_s \hat{E}_s)}{dt'} = \rho_{s,in} q_{s,in} \hat{E}_{s,in} - \rho_s q_s \hat{E}_s + Q_0^s V - \dot{W}_s V \quad (\text{C.2b})$$

$$\frac{d(\alpha_g V \rho_g Y_i^g)}{dt'} = \rho_{g,in} q_{g,in} Y_{i,in}^g - \rho_g q_g Y_i^g + W_i^g \mathcal{G}_i^g V, \quad i = 1, \dots, n_g \quad (\text{C.2c})$$

$$\frac{d(\alpha_g V \rho_g \hat{E}_g)}{dt'} = \rho_{g,in} q_{g,in} \hat{E}_{g,in} - \rho_g q_g \hat{E}_g + Q_0^g V - \dot{W}_g V \quad (\text{C.2d})$$

con las ecuaciones de continuidad o de balance total de masa de ambas fases:

$$\frac{d(\alpha_g V \rho_g)}{dt'} = \rho_{g,in} q_{g,in} - \rho_g q_g + \dot{M}_{s \rightarrow g} V; \quad V_g = \alpha_g V \quad (\text{C.2e})$$

$$\frac{d(\alpha_s V \rho_s)}{dt'} = \rho_{s,in} q_{s,in} - \rho_s q_s - \dot{M}_{s \rightarrow g} V; \quad V_s = \alpha_s V \quad (\text{C.2f})$$

y los términos fuente de dichas ecuaciones están definidas por las expresiones:

$$\mathcal{G}_i^\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = \sum_{j=1}^m s_{i,j}^\pi \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad i = 1, \dots, n_\pi^R, \quad \pi = s, g \quad (\text{C.2g})$$

$$Q_0^g(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = - \sum_{j=1}^{NRg} \Delta H_j^0 \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) + \mathcal{A}_{sg} h_{sg}(\mathbf{T}) [T_s - T_g] - \mathcal{A}_v h_{gw}(\mathbf{T}) [T_g - T_w] \quad (\text{C.2h})$$

$$Q_0^s(\mathbf{C}, \mathbf{T}) = - \sum_{j=1}^{NRs} \Delta H_j^0 \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) - \mathcal{A}_{sg} h_{sg}(\mathbf{T}) [T_s - T_g] - \mathcal{A}_v h_{sw}(\mathbf{T}) [T_s - T_w] \quad (\text{C.2i})$$

$$\Delta H_j^0 = \Delta H_j(T_0) = \sum_{i=1}^{n_\pi} s_{i,j}^\pi \Delta H_i^f(T_0), \quad \pi = s, g$$

$$\dot{M}_{s \rightarrow g} = \alpha_g \sum_{i=1}^{n_g} W_i^g \sum_{j=1}^m s_{i,j}^g \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \quad (\text{C.2j})$$

donde α_s (o α_g) es la fracción del volumen V del tanque ocupada por el sólido (o por el gas, también llamada porosidad del lecho), ρ_s (o ρ_g) es la densidad absoluta de la fase sólida (o gaseosa), Y_i^s (o Y_i^g) es la fracción de la masa total de la fase sólida (o gaseosa) que pertenece a la especie i -ésima del sólido (o gas), \hat{E}_s (o \hat{E}_g) es la energía por unidad de masa o energía específica de la fase sólida (o gaseosa), \dot{W}_s (o \dot{W}_g) es el término que representa el trabajo realizado por o sobre el sistema hacia o desde el exterior, W_i^s (o W_i^g) es el peso molecular de la componente i -ésima de la fase sólida (o gaseosa), $\Delta H_i^f(T_0)$ es el cambio de entalpía por la formación de la especie o componente i -ésima a temperatura y presión estándar, mientras

que ΔH_j^0 es el cambio de entalpía debido a la j -ésima reacción en condiciones estándar de temperatura y presión.

La deducción del conjunto de ecuaciones (C.1) a partir del conjunto de balances de masa y energía (C.2) se realiza de acuerdo a la siguiente serie de pasos:

1. Las ecuaciones de balance molar de las especies de ambas fases (C.1a),(C.1c) se obtienen al dividir la ecuación de conservación de masa de cada componente (C.2a), (C.2c) por el peso molecular W_i^s, W_i^g correspondiente y reescribir el balance en términos de concentraciones aparentes de acuerdo a la ecuación (C.3), la cual junto a la ecuación (C.4) relaciona las variables de densidad absoluta con las variables de concentración aparente en ambas fases.

$$C_i^\pi = \frac{\alpha_\pi \rho_\pi Y_i^\pi}{W_i^\pi} = C_\pi X_i^\pi, \quad X_i^\pi = \left(\frac{W_\pi}{W_i^\pi} \right) Y_i^\pi, \quad \pi = s, g \quad (C.3)$$

$$C_\pi = \frac{\alpha_\pi \rho_\pi}{W_\pi}, \quad W_\pi = \sum_{i=1}^{n_\pi} W_i^\pi X_i^\pi = \left(\sum_{i=1}^{n_\pi} \frac{Y_i^\pi}{W_i^\pi} \right)^{-1} \quad \pi = s, g \quad (C.4)$$

2. Las ecuaciones de balance de calor en términos de la temperatura (C.1b), (C.1d) se extraen de las ecuaciones de conservación de energía (C.2b), (C.2d) al reescribir estas últimas en términos de la energía interna primero y de la entalpía específica de cada fase posteriormente para finalmente sustituir la definición de entalpía en términos de concentraciones o densidades parciales de las componentes químicas de la fase y su temperatura. A continuación se detalla este procedimiento para ambas fases ($\pi = s, g$) mediante un conjunto de consideraciones:

- a) La energía específica total \hat{E}_π está compuesta por la energía interna \hat{U}_π y por las energías mecánicas cinética \hat{K}_π y potencial $\hat{\Phi}_\pi$ del flujo de la fase π . Sin embargo, debido a que se desean determinar los perfiles de temperatura entónces se restan las energías mecánicas de la ecuación de balance de energía total y se escribe en función de \hat{U}_π la ecuación correspondiente (C.2b) o (C.2d):

$$\frac{d \left(\alpha_\pi V \rho_\pi \hat{U}_\pi \right)}{dt} = \rho_{\pi, in} q_{\pi, in} (\hat{U}_{\pi, in} + P_{\pi, in} \hat{V}_{\pi, in}) - \rho_\pi q_\pi (\hat{U}_\pi + P_\pi \hat{V}_\pi) + Q_0^\pi V - \dot{W}_{m\pi} V \quad (C.5)$$

en la cual el término de trabajo \dot{W}_π se ha separado en dos tipos distintos: trabajo de flujo $\dot{W}_{f\pi}$ y trabajo mecánico (shaft work) $\dot{W}_{m\pi}$ de acuerdo a la expresión:

$$\dot{W}_\pi V = \dot{W}_{m\pi} V - \rho_{\pi, in} q_{\pi, in} P_{\pi, in} \hat{V}_{\pi, in} + \rho_\pi q_\pi P_\pi \hat{V}_\pi$$

donde \hat{V}_π es el volumen específico de la fase π o el recíproco de la densidad $\hat{V}_\pi = \frac{1}{\rho_\pi}$ y P_π la presión de la fase π .

- b) Se emplea la relación termodinámica que define la entalpía específica o entalpía por unidad de masa \hat{H}_π en términos de la energía interna \hat{U}_π :

$$\hat{H}_\pi = \hat{U}_\pi + P_\pi \hat{V}_\pi \quad (\text{C.6})$$

para obtener un balance en términos de la entalpía específica:

$$\frac{d\alpha_\pi V \rho_\pi \hat{H}_\pi}{dt} = \rho_{\pi,in} q_{\pi,in} \hat{H}_{\pi,in} - \rho_\pi q_\pi \hat{H}_\pi + Q_0^\pi V - \dot{W}_{m\pi} V - \frac{d\alpha_\pi P_\pi}{dt} V \quad (\text{C.7})$$

Debido a que no se realiza ningún trabajo en el exterior del sistema y a que los cambios de presión en el sistema son despreciables se obtiene una expresión final para el balance de entalpía:

$$\frac{d\alpha_\pi V \rho_\pi \hat{H}_\pi}{dt} = \rho_{\pi,in} q_{\pi,in} \hat{H}_{\pi,in} - \rho_\pi q_\pi \hat{H}_\pi + Q_0^\pi V \quad (\text{C.8})$$

- c) Con el objetivo de obtener una ecuación de balance para la temperatura de la fase π a partir de la ecuación (C.8), se sustituye en ella la definición de entalpía específica para un sistema multicomponente dada por las ecuaciones:

$$\hat{H}_\pi(\mathbf{C}_\pi, T_\pi) = \sum_{i=1}^{n_\pi} \hat{H}_i^\pi(T_\pi) Y_i^\pi, \quad i = 1, 2, \dots, n_\pi \quad (\text{C.9})$$

$$\hat{H}_i^\pi(T_\pi) = \int_{T_0}^{T_\pi} \hat{C}_{pi}^\pi(T) dT \quad o \quad \frac{d\hat{H}_i^\pi}{dT_\pi} = \hat{C}_{pi}^\pi(T_\pi) \quad (\text{C.10})$$

donde \hat{H}_i^π es la entalpía térmica o calor sensible específico (por unidad de masa) de la i -ésima especie de la fase π y \hat{C}_{pi}^π es el calor específico (en $kJ/K \cdot kg$) de la i -ésima especie de la fase π . La ecuación resultante de la sustitución de dicha definición es:

$$\sum_{i=1}^{n_\pi} \frac{dV \alpha_\pi \rho_\pi Y_i^\pi \hat{H}_i^\pi}{dt'} = \sum_{i=1}^{n_\pi} \rho_{\pi,in} q_{\pi,in} Y_{i,in}^\pi \hat{H}_{i,in}^\pi - \sum_{i=1}^{n_\pi} \rho_\pi q_\pi Y_i^\pi \hat{H}_i^\pi + Q_0^\pi$$

Se desarrollan los productos de la derivada temporal para escribir la dinámica de la entalpía en términos de la dinámica de las densidades de las especies y sustituir las expresiones que la definen (C.2a), (C.2c) en la fase π :

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{n_\pi} \rho_{\pi,in} q_{\pi,in} Y_{i,in}^\pi \hat{H}_i^\pi - \sum_{i=1}^{n_\pi} \rho_\pi q_\pi Y_i^\pi \hat{H}_i^\pi + \sum_{i=1}^{n_\pi} W_i^\pi \mathcal{G}_i^\pi \hat{H}_i^\pi V \\ & + V \sum_{i=1}^{n_\pi} \alpha_\pi \rho_\pi Y_i^\pi \frac{d\hat{H}_i^\pi}{dt} = \sum_{i=1}^{n_\pi} \rho_{\pi,in} q_{\pi,in} Y_{i,in}^\pi \hat{H}_{i,in}^\pi - \sum_{i=1}^{n_\pi} \rho_\pi q_\pi Y_i^\pi \hat{H}_i^\pi + Q_0^\pi V \end{aligned}$$

Agrupando términos semejantes, escribiendo la derivada temporal de la entalpía \hat{H}_i^π en términos de la derivada de la temperatura (C.10) y sustituyendo el término fuente de las especies \mathcal{G}_i^π , la ecuación de entalpía resultante define la dinámica de la temperatura:

$$V\alpha_\pi\rho_\pi\hat{C}_p^\pi(T_\pi)\frac{dT_\pi}{dt}=\rho_{\pi,in}q_{\pi,in}\sum_{i=1}^{n_\pi}Y_{i,in}^\pi(\hat{H}_{i,in}^\pi-\hat{H}_i^\pi)+Q^\pi V \quad (\text{C.11})$$

donde \hat{C}_p^π es el calor específico de la fase π y está definido como:

$$\hat{C}_p^\pi(T_\pi)=\sum_{i=1}^{n_\pi}\hat{C}_{pi}^\pi(T_\pi)Y_i^\pi \quad (\text{C.12})$$

y Q^π es el término de generación de calor de las ecuaciones (C.2h)-(C.2i), el cual es reescrito en términos de las entalpías parciales sensibles de las especies a la temperatura actual de la fase π :

$$\begin{aligned} Q^\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) &= Q_0^\pi(\mathbf{C}, \mathbf{T}) - \sum_{j=1}^m \left[\sum_{i=1}^{n_\pi} s_{i,j}^\pi W_i^\pi \hat{H}_i^\pi(T_\pi) \right] \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}), \quad \pi = s, g \\ Q^g(\mathbf{C}, \mathbf{T}) &= - \sum_{j=1}^{NRg} \Delta H_j \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) + \mathcal{A}_{sg} h_{sg}(\mathbf{T}) [T_s - T_g] \\ &\quad - \mathcal{A}_v h_{gw}(\mathbf{T}) [T_g - T_w] - \sum_{j=NRg+1}^m \left[\sum_{i=1}^{n_\pi} s_{i,j}^\pi \hat{H}_i^\pi W_i^\pi \right] \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) \\ Q^s(\mathbf{C}, \mathbf{T}) &= - \sum_{j=1}^{NRs} \Delta H_j \mathcal{R}_j(\mathbf{C}, \mathbf{T}) - \mathcal{A}_{sg} h_{sg}(\mathbf{T}) [T_s - T_g] \\ &\quad - \mathcal{A}_v h_{sw}(\mathbf{T}) [T_s - T_w] \\ \Delta H_j(T_\pi) &= \sum_{i=1}^{n_\pi} s_{i,j}^\pi \left[\Delta H_i^f(T_0) + W_i^\pi \hat{H}_i^\pi(T_\pi) \right] \end{aligned}$$

- d) Con el propósito de simplificar los términos de flujo (transporte) de la ecuación de temperatura (C.11), se considera que el calor específico de las especies componentes es constante por lo que:

$$\hat{H}_i^\pi(T_\pi) = \hat{C}_{pi}^\pi(T_\pi - T_0)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación (C.11) se obtiene:

$$V\alpha_\pi\rho_\pi\hat{C}_p^\pi\frac{dT_\pi}{dt}=\rho_{\pi,in}q_{\pi,in}\hat{C}_{p,in}^\pi(T_{\pi,in}-T_\pi)+Q^\pi V \quad (\text{C.13})$$

donde \hat{C}_p^π esta definida en (C.12) y

$$\hat{C}_{p,in}^\pi = \sum_{i=1}^{n_\pi} \hat{C}_{pi}^\pi Y_{i,in}^\pi$$

e) Finalmente la ecuación (C.13) se reescribe en términos de la concentraciones y calor específico molar mediante las relaciones:

$$C_\pi C_p^\pi = \alpha_\pi \rho_\pi \hat{C}_p^\pi, \quad C_{\pi,in} C_{p,in}^\pi = \alpha_\pi \rho_{\pi,in} \hat{C}_{p,in}^\pi$$

Apéndice D

Comportamiento no lineal espurio de modelos discretizados.

Las diferencias entre los comportamientos de un modelo continuo (sistema de EDPs y/o EDOs con valores a la frontera e iniciales) y el modelo discreto (modelo en EDOs y/o en ecuaciones en diferencias con valores iniciales) proveniente del algoritmo numérico no son sólo cuantitativos sino también cualitativos debido a que los sistemas discretos no lineales resultantes pueden exhibir comportamientos dinámicos más variados que sus contrapartes continuas.

Estudios relativamente recientes: Yee *et al.* (1991), Yee y Sweby (1995) y Lafon y Yee (1996a) muestran que los métodos de discretización de ecuaciones diferenciales ampliamente usados pueden producir un modelo discreto que exhiba las siguientes características:

- Posee los estados estacionarios originales del modelo continuo llamados correctos.
- Tiene estados estacionarios diferentes a los que presenta el modelo continuo llamados espurios o falsos.
- Las regiones de atracción de los estados estacionarios estables del modelo continuo son contraídas y/o segmentadas.
- Presenta ciclos límite espurios que no están presentes en el modelo continuo.
- Los estados estacionarios del modelo continuo tienen diferente estabilidad y tipo (nodo, foco, silla).

Cabe destacar que los métodos de discretización espacial y de discretización temporal introducen por separado comportamientos dinámicos espurios al modelo discreto resultante.

Yee y Sweby (1995) y Lafon y Yee (1996a) muestran que los métodos de discretización de diferencias finitas implícitos lineales (upwind para discretización espacial y métodos lineales de múltiples pasos para la discretización temporal) son adecuados para evitar y/o reducir el comportamiento espurio del modelo. Los métodos de discretización temporal sólo

introducen puntos fijos de periodicidad mayor a uno debido a que son lineales en el parámetro de discretización (paso o intervalo entre nodos). Además, preservan el número de estados estacionarios (puntos fijos de periodo uno) del modelo continuo, sólo modificando su estabilidad y tipo para ciertos valores del parámetro de discretización. Así mismo, dichos métodos modifican en menor grado la forma y el tamaño de las regiones de atracción del modelo continuo.

El efecto de la rigidez proveniente del término fuente de un modelo dinámico distribuido (sistema convectivo-reactivo) en la desaparición del estado estacionario espurio tras reducir el intervalo de discretización es analizado en Lafon y Yee (1996a) y Lafon y Yee (1996b). Tres métodos numéricos de la interpolación del término fuente en combinación con tres métodos de discretización del término convectivo son analizados mediante diagramas de bifurcación con respecto al número de Damkohler. Se encuentra que la reducción más significativa del comportamiento espurio empleando el método de interpolación de upwind e conjunción con el método de diferencias finitas upwind para el término convectivo.

El comportamiento espurio inducido por el algoritmo de discretización (incluso si se utiliza un valor del intervalo de discretización por debajo del límite de estabilidad lineal del método) se manifiesta de diferentes maneras en la solución provista por la simulación numérica:

- Convergencia lenta a un estado estacionario correcto del modelo continuo.
- Convergencia a un estado estacionario correcto diferente al esperado dadas las condiciones iniciales introducidas a la simulación.
- Convergencia a un estado estacionario espurio.
- Convergencia a un ciclo límite espurio, produciendo comportamiento oscilatorio periódico.
- Divergencia o inestabilidad de la solución.

Una característica fundamental del comportamiento espurio introducido por el método numérico es que éste desaparece o se reduce si se utiliza un intervalo de discretización menor a un valor crítico o un número de nodos mayor a un valor de bifurcación.

Bibliografía

- Aiken, Richard C. (1985). *Stiff Computation*. Oxford University Press.
- All-Power-Labs (2012). <http://www.gekgasifier.com/info/gasification-basics/gasifier-types>.
- Alvaré, Javier y Al-Dahhan, Muthanna H. (2006). Liquid phase mixing in trayed bubble column reactors. *Chemical Engineering Science*, **61**, pp. 1819 – 1835.
- Amundson, Neal R. y Arri, Luis Ernesto (1978). Char gasification in a countercurrent reactor. *AIChE Journal*, **24**, pp. 87–101.
- Aris, Rutherford (1961). *The Optimal Design of Chemical Reactors: A study in dynamic programming*. Academic Press, N.Y..
- Aris, Rutherford (1965). *Introduction to the analyses of chemical reactors*. Prentice-Hall New Jersey.
- Aris, Rutherford (1999). *Mathematical modeling: A chemical engineer's perspective*. Academic Press, N.Y..
- Aris, Rutherford y Amundson, Neal R. (1957). Some remarks on longitudinal mixing or diffusion in fixed beds. *AIChE Journal*, **3**, pp. 280–282.
- Arri, Luis Ernesto y Amundson, Neal R. (1978). An analytical study of single particle char gasification. *AIChE Journal*, (**24**), pp. 72–87.
- Badillo-Hernandez, Ulises; Alvarez-Icaza, Luis y Alvarez, Jesus (2013). Model design of a class of moving-bed tubular gasification reactors. *Chemical Engineering Science*, **101**, pp. 674–685.
- Badillo-Hernández, Ulises (2009). Modelado orientado a control de gasificadores. *Tesis de Maestría, Facultad de Ingeniería UNAM, México, D.F.*
- Badillo-Hernández, Ulises y Alvarez-Icaza, Luis (2010). Modelado orientado al control de una clase de reactores de gasificación. *Congreso anual 2010 de la Asociación de México de Control Automático*.
- Bai, Z.; Demmel, J.; Dongarra, J.; Ruhe, A. y van der Vorst, H. (2000). *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems: A Practical Guide*. SIAM, Philadelphia.
- Balas, M. J. (1982). Reduced-order feedback control of distributed parameter systems via singular perturbation methods. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, **87**, pp. 281–294.

- Balas, M. J. (1991). Nonlinear finite-dimensional control of a class of nonlinear distributed parameter systems using residual-mode filters: A proof of local exponential stability. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, **162**, pp. 63–70.
- Baldea, Michael y Daoutidis, Prodromos (2007). Dynamics and control of autothermal reactors for the production of hydrogen. *Chemical Engineering Science*, **62**, pp. 3218 – 3230.
- Barrio, M.; Fossum, M. y Hustad, J.E. (2001). A small-scale stratified downdraft gasifier coupled to a gas engine for combined heat and power production. *Progress in Thermochemical Biomass Conversion, Blackwell Science*, **1**, pp. 426–440.
- Basu, Prabir (2006). *Combustion and gasification in fluidized beds*. Taylor and Francis.
- Bird, R. Byron; Stewart, Warren E. y Lightfoot, Edwin N. (1960). *Transport Phenomena*. John Wiley and Sons, Inc., 1ª edición.
- Canales Meza, Luis A. (2013). Reducción de orden en modelos para reactores de gasificación. *Tesis de Maestría, Facultad de Ingeniería UNAM, México, D.F.*
- Caram, Hugo S. y Fuentes, Carmelo (1982). Simplified model for a countercurrent char gasifier. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **21**, pp. 464–472.
- Castellanos-Sahagun, E.; Alvarez, J. y Alvarez-Ramirez, J. (2006). Two-point composition-temperature control of binary distillation columns. *Industrial and Engineering Chemical Research*, **45**, pp. 9010–9023.
- Christofides, P. D. (2001). *Nonlinear and robust control of partial differential equation systems: methods and applications to transport-reaction processes*. Birkhauser.
- Christofides, P. D. y Daoutidis, P. (1996). Nonlinear control of diffusion-convection-reaction processes. *Computers and Chemical Engineering*, **20**, pp. S1071–S1076.
- Christofides, P. D. y Daoutidis, P. (1997). Finite-dimensional control of parabolic PDE systems using approximate inertial manifolds. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, **216**, pp. 398–420.
- Christofides, P.D. (1998). Robust control of parabolic PDE systems. *Chemical Engineering Science*, **53**, pp. 2949–2965.
- Coste, J.; Rudd, D. y Amundson, N. R. (1961). Taylor diffusion in tubular reactors. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **39**, pp. 149–151.
- Countou-Carrere, Marie Nathalie y Daoutidis, Prodromos (2008). Model reduction and control of multi-scale reaction-convection processes. *Chemical Engineering Science*, **63**, pp. 4010–4025.
- Curtain, R. (1985). Pole assignment for distributed systems by finite dimensional control. *Automatica*, **21**, pp. 57–67.

- Danckwerts, P.V. (1953). Continuous flow systems: Distribution of residence times. *Chemical Engineering Science*, **2**, pp. 1–13.
- de Boor, Carl (2001). *A practical guide to splines*. Springer.
- Deans, H. A. y Lapidus, L. (1960). A computational model predicting and correlating the behavior of fixed bed reactors: II Extension to chemically reactive systems. *AIChE Journal*, **6**, pp. 663–668.
- Deckwer, Wolf-Dieter (1974). The backflow cell model—applied to non-isothermal reactors. *The Chemical Engineering Journal*, **8**, pp. 135 – 144.
- Dejager, E M. y Furu, Jiang (1996). *The theory of singular perturbations*. North-Holland Elsevier.
- Di Blasi, Colomba (2000). Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers. *Chemical Engineering Science*, **55**, pp. 2931–2944.
- Di Blasi, Colomba (2004). Modeling wood gasification in a countercurrent fixed-bed reactor. *AIChE Journal*, **50**, pp. 2306–2319.
- Diaz-Salgado, J.; Alvarez, J.; Schaum, A. y Moreno, J.A. (2012). Feedforward output-feedback control for continuous exothermic reactors with isotonic kinetics. *Journal of Process Control*, **22**, pp. 303–320.
- Eigenberger, G. (1972). On the dynamic behavior of the catalytic fixed-bed reactor in the region of multiple steady states—I. The influence of heat conduction in two phase models. *Chemical Engineering Science*, **27**, pp. 1909 – 1915.
- Feinberg, Martin (1977). Mathematical aspects of mass action kinetics. *Chapter 1 in Chemical reactor theory, a review*. Editors: Leon Lapidus and Neal R. Amundson, Prentice Hall.
- Fernandez, C.; Alvarez, J.; Baratti, Roberto y Frau, Andrea (2012). Estimation structure design for staged systems. *Journal of Process Control*, **22**, pp. 2038 – 2056.
- Ferziger, Joel H. y Peric, Milovan (2002). *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 3ª edición.
- Frau, Andrea; Baratti, Roberto y Alvarez, Jesus (2010). Estimation model design for a multi-component distillation column with temperature measurements. *20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*.
- García Anaya, José Manuel (2014). Estudio de la dinámica de un reactor tubular para producir gas de síntesis a partir de material orgánico. *Tesis de Maestría (en curso), Facultad de Química UNAM, México, D.F.*
- Gill, P.; Murray, W y Wright, M. (1981). *Practical Optimization*. Elsevier Academic Press.
- Gobel, Benny; Henriksen, Ulrik; Jensen, Torben Kvist; Qvale, Bjorn y Houbak, Niels (2007). The development of a computer model for a fixed bed gasifier and its use for optimization and control. *Bioresource Technology*, **98**, pp. 2043 – 2052.

- Grieco, Enrico Maria y Baldi, Giancarlo (2011). Predictive model for countercurrent coal gasifiers. *Chemical Engineering Science*, **66**, pp. 5749 – 5761.
- Guckenheimer, J. y Holmes, P. (1983). *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems and Bifurcations of Vector Fields*. Springer-Verlag N.Y..
- Hartland, S. y Mecklenburgh, J.C. (1966). A comparison of differential and stagewise counter current extraction with backmixing. *Chemical Engineering Science*, **21**, pp. 1209 – 1229.
- Higman, Christopher y van der Burgt, Maarten (2008). *Gasification*. Gulf Professional Publishing, 2ª edición.
- Hobbs, M.L.; Radulovic, P.T. y L.D., Smoot (1992). Modeling Fixed-Bed Coal Gasifiers. *AIChE Journal*, (**38**), p. 681.
- Hobbs, M.L.; Radulovic, P.T. y Smoot, L.D. (1993). Combustion and gasification of coals in fixed-beds. *Progress in Energy and Combustion Science*, **19**, pp. 505 – 586.
- Holmes, Mark H. (2013). *Introduction to Perturbation Methods, Second Edition*. Springer.
- Hoppensteadt, F. C. (1966). Singular perturbations on the infinite interval. *Transactions of the American Mathematical Society*, **123**, pp. 521–535.
- Hoppensteadt, F. C. (1971). Properties of solutions of ordinary differential equations with small parameters. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, **24**, pp. 807–840.
- Karppanen, Erkki (2000). Advanced control of an industrial circulating fluidized bed boiler using fuzzy logic. *Tesis de Doctorado, Faculty of Technology, University of Oulu, Finland*.
- Kevorkian, J. y Cole, J.D. (1996). *Multiple scale and singular perturbation methods*. Applied Mathematical Sciences Springer-Verlag.
- Khalil, Hassan K.. (2002). *Nonlinear Systems, Third Edition*. Prentice Hall.
- Knoef, HAM (2000). Inventory of biomass gasifier manufacturers & installations, Final report to European commission, Contract DIS/1734/98-NL. *Informe técnico*, Biomass Technology Group B.V, University of Twente, Enschede.
- Kokotovic, P. V.; Khalil, H. K. y O'Reilly, J. (1999). *Singular Perturbation Methods in Control: Analysis and Design*. SIAM Classics in Applied Mathematics.
- Kramers, H. y Alberda, G. (1953). Frequency response analysis of continuous flow systems. *Chemical Engineering Science*, **2**, pp. 173 – 181.
- Krstic, Miroslav; Kanellakopoulos, Ioannis y Kokotovic, Petar (1995). *Nonlinear and Adaptive Control Design*. Wiley New York.
- Kuznetsov, Yuri A. (1998). *Elements of Applied Bifurcation Theory*. Springer.

- Lafon, A. y Yee, H. C. (1996a). Dynamical Approach Study of Spurious Steady-State Numerical Solutions of Nonlinear Differential Equations, Part III: The Effects of Nonlinear Source Terms in Reaction-Convection Equations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **6** (1), pp. 1–36.
- Lafon, A. y Yee, H. C. (1996b). Dynamical Approach Study of Spurious Steady-State Numerical Solutions of Nonlinear Differential Equations Part IV. Stability vs. Methods of Discretizing Nonlinear Source Terms in Reaction-Convection Equations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **6** (2), pp. 89–123.
- Levenspiel, Octave (1962). *Chemical reaction engineering: an introduction to the design of chemical reactors*. John Wiley and Sons.
- Levenspiel, Octave (1999). *Chemical Reaction Engineering*. John Wiley and Sons.
- Levenspiel, Octave y Bischoff, Kenneth B. (1964). *Patterns of Flow in Chemical Process Vessels*. volumen 4 de *Advances in Chemical Engineering*. Academic Press.
- Lindstedt, Anders (1882). Ueber die Integration einer für die Störungstheorie wichtigen Differentialgleichung. *Astronomische Nachrichten*, **103**, pp. 211–220.
- Liu, Shean-lin y Amundson, N. R. (1962). Stability of Adiabatic Packed Bed Reactors. An Elementary Treatment. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **1**, pp. 200–208.
- Lopez, T. y Alvarez, J. (2004). On the effect of the estimation structure in the functioning of a nonlinear copolymer reactor estimator. *Journal of Process Control*, **14**, pp. 99–109.
- Manurung, R.K. y Beenackers, A.A.C.M. (1993). Modeling and Simulation of an Open Core Down-draft Moving Bed Rice Husk Gasifier. *Proceedings of the International Conference on Advances in Thermochemical Biomass Conversion*, **1**, pp. 288–309.
- Martinez-Vera, C.; Ruiz-Martinez, R.S.; Vizcarra-Mendoza, M.G. y Alvarez-Calderon, J. (2010). Apparent diffusion model assessment in extraction processes by means of a Luenberger observer. *Journal of Food Engineering*, **101**, pp. 16–22.
- Milligan, Jimmy B. (1994). Downdraft gasification of biomass. *PhD Thesis, Aston University*.
- Miyachi, Terukatsu y Vermeulen, Theodore (1963). Diffusion and Back-Flow Models for Two-Phase Axial Dispersion. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **2**, pp. 304–310.
- Murdock, James A. (1999). *Perturbations: Theory and Methods*. SIAM Classics in Applied Mathematics.
- Naidu, D. S. (1988). *Singular perturbation methodology in control systems*. IEE control engineering series 34.
- Najera, Israel (2012). Modelado y control de una clase de reactores tubulares exotérmicos. *Tesis de Maestría, UAM Iztapalapa, Mexico, D.F.*

- Patankar, Suhas V. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor and Francis.
- Poincaré, Henri (1892). *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste, tomo I y II*. Gauthier-Villars et fils, Paris.
- Prandtl, Ludwig (1905). Über Flüssigkeitsbewegung bei sehr kleiner Reibung. *Proceedings of the 3rd International Congress of Mathematicians, Heidelberg*.
- Reed, T.; Walt, R.; Ellis, S.; Das, A. y Deutch, S. (1999). Superficial velocity-the key to downdraft gasification. *Fourth Biomass Conference of the Americas, Oakland, USA.*, **25**, pp. 343–356.
- Reed, T. B. y Markson, M. (1985). Biomass gasification reaction velocities. *Fundamentals of Thermochemical Biomass Conversion, Elsevier*, p. 951.
- Reed, Thomas B. y Das, Agua (1988). *Handbook of Biomass Downdraft Gasifier Engine Systems*. Solar Technical Information Program.
- Rogel, A. y Aguillon, J. (2006). The 2D Eulerian Approach of Entrained Flow and Temperature in a Biomass Stratified Downdraft Gasifier. *American Journal of Applied Sciences.*, **3**, pp. 2068–2075.
- Rogel, Alejandro Ramírez (2007). Estudio numérico experimental de un gasificador estratificado que opera con biomasa, utilizando CFD. *Tesis de Doctorado, Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería UNAM, México, D.F.*
- Sakawa, Y. (1983). Feedback stabilization of linear diffusion systems. *SIAM Journal on Control and Optimization*, **21**, pp. 667–676.
- Schaum, A.; Alvarez, J. y Lopez-Arenas, T. (2012). Output-feedback saturated control of a class of continuous biological reactors with inhibited kinetics. *Chemical Engineering Science*, **68**, pp. 520–529.
- Schiesser, William E. y Griffiths, Graham W. (2009). *A Compendium of Partial Differential Equation Models: Method of Lines Analysis with Matlab*. Cambridge University Press.
- Sepulchre, R.; Jankovic, M. y Kokotovic, Petar (1997). *Constructive Nonlinear Control*. Springer.
- Shvartsman, S. Y. y Kevrekidis, I. G. (1998). Nonlinear model reduction for control distributed systems: a computer-assisted study. *AIChE Journal*, **44**, pp. 1579–1595.
- Shwe, San (2004). A Theoretical and Experimental Study on a Stratified Downdraft Biomass Gasifier. *PhD Thesis, University of Melbourne*.
- Sinkule, J.; Hlávacek, V.; Votruba, J. y Tvrđík, I. (1974). Modeling of chemical reactors - XXIX Mixing-cell model for packed bed reactors. Steady state considerations. Problems of multiplicity. *Chemical Engineering Science*, **29**, pp. 689 – 696.
- Skogestad, Sigurd y Postlethwaite, Ian (2005). *Multivariable Feedback Control, Segunda Edición*. John Wiley and Sons.

- Steindl, A. y Troger, H. (2001). Methods for dimension reduction and their application in nonlinear dynamics. *International Journal of Solids and Structures*, **38**, pp. 2131–2147.
- TASC, Editor: Arthur Gelb, The Analytic Sciences Corporation (1974). *Applied optimal estimation*. The MIT Press.
- Taylor, Geoffrey (1953). Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, **219**, pp. 186–203.
- Tikhonov, A. N. (1952). Systems of differential equations containing small parameters multiplying some of the derivatives. *Mathematical Sbornik*, **31**, pp. 575–586.
- van Heerden, C. (1958). The character of the stationary state of exothermic processes. *Chemical Engineering Science*, **8**, pp. 133 – 145.
- Vanderveen, John W.; Luss, Dan y Amundson, Neal R. (1968). Stability of adiabatic packed bed reactors. Effect of flow variations and coupling between the particles. *AIChE Journal*, **14**, pp. 636–643.
- Varma, A. y Amundson, N. R. (1972). Some problems concerning the non-adiabatic tubular reactor a-priori bounds, qualitative behavior, preliminary uniqueness and stability considerations. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **50**, p. 470.
- Varma, A. y Amundson, N. R. (1973a). Some observations on uniqueness and multiplicity of steady states in non-adiabatic chemically reacting systems. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **51**, p. 206.
- Varma, Arvind (1980). On the Number and Stability of Steady States of a Sequence of Continuous-Flow Stirred Tank Reactors. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, **19**, pp. 316–319.
- Varma, Arvind y Amundson, Neal R. (1973b). The non-adiabatic tubular reactor: Stability considerations. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **51**, pp. 459–467.
- Vasil'eva, 13-81., A. B. 18 (1963). Asymptotic behavior of solutions to certain problems involving nonlinear differential equations containing a small parameter multiplying the highest derivatives. *Russian Mathematical Surveys*, **18**, pp. 13–81.
- Wang, Yue y Kinoshita, Charles M. (1993). Temperature fields in downdraft biomass gasification. *Proceedings of the International Conference on Advances in Thermochemical Biomass Conversion*, **1**, pp. 280–287.
- Yee, H. C. y Sweby, P. K. (1995). Dynamical approach study of spurious steady-state numerical solutions of nonlinear differential equations II: Global asymptotic behavior of time discretizations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **4**, pp. 219–283.

Yee, H.C; Sweby, P.K y Griffiths, D.F (1991). Dynamical approach study of spurious steady-state numerical solutions of nonlinear differential equations. I. The dynamics of time discretization and its implications for algorithm development in computational fluid dynamics. *Journal of Computational Physics*, **97 (2)**, pp. 249 – 310.

Zauderer, E. (1989). *Partial differential equations of applied mathematics*. John Wiley and Sons.